

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشکده علوم پایه، گروه فیزیک
پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد
عنوان:

ترابرد الکترونی از میان یک نانوساختار در یک میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده

استاد راهنما:

دکتر سعید حسامی پیلهرود

نگارنده :

مریم نصیری

شهریور ۱۳۹۶

تقدیر و تشکر:

پاس یکمیان پروردگار یکتا را که هستی مان بخشید و به طریق علم و دانش رهنمونان شد و به بهنشینان رهروان علم و دانش مستخرمان نمود و خوشه چینی از علم و معرفت را روزیایان ساخت.

و طیفه خودی دانم از تاملی عزیزان و اساتید محترم که اینجانب را در انجام این تحقیق یاری نمودند تشکر کنم.
بخصوص از زحمات استاد بزرگوارم جناب آقای دکتر معید حسامی پید رود که با صبر و حوصله سی فراوان در تمام مراحل، راهنمای من بودند، کمال تشکر و قدردانی را دارم.

از خانواده عزیزم که در امر تحصیل، مشوق من بوده اند، کمال تشکر و پاس را دارم.

تعهد نامه

1

اینجانب مریم نصیری دانشجوی دوره کارشناسی ارشد رشته فیزیک حالت جامد دانشکده فیزیک دانشگاه صنعتی شاهرود نویسنده پایان نامه: **ترابرد الکترونی از میان یک نانوساختار در یک میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده تحت راهنمایی آقای دکتر سعید حسامی پيله** رود متعهد می شوم.

- تحقیقات در این پایان نامه توسط اینجانب انجام شده است و از صحت و اصالت برخوردار است.
- در استفاده از نتایج پژوهشهای محققان دیگر به مرجع مورد استفاده استناد شده است.
- مطالب مندرج در پایان نامه تاکنون توسط خود یا فرد دیگری برای دریافت هیچ نوع مدرک یا امتیازی در هیچ جا ارائه نشده است.
- کلیه حقوق معنوی این اثر متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد و مقالات مستخرج با نام « دانشگاه شاهرود » و یا « Shahrood University » به چاپ خواهد رسید.
- حقوق معنوی تمام افرادی که در به دست آمدن نتایج اصلی پایان نامه تأثیرگذار بوده اند در مقالات مستخرج از پایان نامه رعایت می گردد.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه ، در مواردی که از موجود زنده (یا بافتهای آنها) استفاده شده است ضوابط و اصول اخلاقی رعایت شده است.
- در کلیه مراحل انجام این پایان نامه، در مواردی که به حوزه اطلاعات شخصی افراد دسترسی یافته یا استفاده شده است اصل رازداری ، ضوابط و اصول اخلاق انسانی رعایت شده است.

تاریخ

امضای دانشجو

مالکیت نتایج و حق نشر

- کلیه حقوق معنوی این اثر و محصولات آن (مقالات مستخرج، کتاب، برنامه های رایانه ای، نرم افزار ها و تجهیزات ساخته شده است) متعلق به دانشگاه شاهرود می باشد. این مطلب باید به نحو مقتضی در تولیدات علمی مربوطه ذکر شود.
- استفاده از اطلاعات و نتایج موجود در پایان نامه بدون ذکر مرجع مجاز نمی باشد.

چکیده

در سالهای اخیر مطالعه رفتار گاز الکترونی در نانوساختارهای نیم رسانا ، توجه بسیاری را به خود جلب نموده است. در این بین، بررسی ترابرد الکترونی و اثرات ناشی از پراکندگی های الکترونی از نواقص و یا ناخالصی ها در نانوساختارها از اهمیت ویژه ای برخوردار بوده است.

در تحقیق حاضر با بهره گیری از رهیافتی مبتنی بر استفاده از معادله لیپمن شوینگر وفرمول لاندائور و محاسبه تابع گرین، اثر پراکندگی الکترونی حاصل از پتانسیل ناخالصی به شکل تابع دلتای دیراک در ضریب عبور و رسانش الکترونی دستگاه گاز الکترون دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی قوی مورد بررسی قرار می گیرد.

نتایج نشان می دهند که رسانندگی کوانتیزه دستگاه با افزایش قدرت میدان مغناطیسی رسانندگی سیستم دچار کاهشی ناچیز می شود. بعلاوه تغییرات اندازه میدان مغناطیسی نوساناتی در الگوی بستگی ضریب عبور الکترونی دستگاه به انرژی فرمی ایجاد می نماید. همچنین مشاهده شد که تغییر مکان ناخالصی در عرض دستگاه می تواند باعث تغییر قابل ملاحظه ضریب عبور الکترونی دستگاه شود.

کلمات کلیدی: ترابرد الکترونی ، نانوساختار ، میدان مغناطیسی کوانتیزه کننده

فهرست:

فصل اول: مقدمه

مقدمه.....	۲
------------	---

فصل دوم: ساختارهای نانو و حالت های الکترونی در سیم کوانتومی

۱-۲ مقدمه.....	۸
۲-۲ تعریف نانو مواد و نانو ساختارها.....	۹
۳-۲ طبقه بندی انواع نانو ساختارها بر اساس تعداد ابعاد آزاد.....	۱۰
۵-۲ سیم کوانتومی.....	۱۴
۷-۲ ترابرد کوانتومی در یک سیستم یک بعدی.....	۱۷
۷-۲-۱ معادله‌ی شرودینگر در سیمهای کوانتومی.....	۱۸
۷-۲-۲ سیم مستطیلی نامحدود.....	۲۰
۷-۲-۳ سیم مستطیلی محدود.....	۲۳
۷-۲-۴ سیم استوانه‌ای.....	۲۶

فصل سوم: پراکندگی در نانوسیم دوبعدی

۱-۳ معادله لیپمن-شوینگر.....	۳۲
۲-۳ معادله لیپمن-شوینگر در پراکندگی سیم کوانتومی.....	۳۳
۳-۳ معادله لیپمن-شوینگر در سیم کوانتومی دو بعدی.....	۳۴
۳-۳-۱ تعیین ویژه حالتها و ویژه مقادیر اولیه.....	۳۵
۳-۳-۲ محاسبه تابع گرین.....	۳۶
۳-۳-۳ محاسبه ماتریس T.....	۳۸
۳-۳-۴ محاسبه تابع موج پراکندگی.....	۳۹
۳-۳-۵ تابع موج کل.....	۴۰
۳-۳-۶ محاسبه ضرایب بازتاب و عبور.....	۴۱

فصل چهارم: پراکندگی نانوسیم دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی

۱-۴ معادله لیپمن-شوینگر در سیم کوانتومی دو بعدی.....	۴۸
۱-۴-۱ تعیین ویژه حالتها و ویژه مقادیر اولیه.....	۴۸
۱-۴-۲ محاسبه تابع گرین.....	۵۰
۱-۴-۳ محاسبه ماتریس T.....	۵۳
۱-۴-۴ محاسبه تابع موج پراکندگی.....	۵۵
۱-۴-۵ تابع موج کل.....	۵۶

۵۸..... ۴-۱-۶ محاسبه ضرایب بازتاب و عبور

فصل پنجم: نتایج و پیشنهادات

۶۸..... ۵-۱ نتایج

۶۹..... ۵-۲ پیشنهادات

۷۰..... منابع :

فهرست تصاویر و نمودارها

- شکل (۱-۲) : انواع نانو ساختارها بر حسب تعداد ابعاد آزاد ۱۰
- شکل (۲-۲) ترتیب نوار رسانش و نوار ظرفیت در پیوند بین GaAs و AlGaAs ۱۳
- شکل (۳-۲) ارتباط بین نوار رسانش و نوار ظرفیت و سطح انرژی فرمی با ساختار MOS ۱۴
- شکل (۴-۲) نمای شماتیک چگالی حالات در یک نقطه کوانتومی ۱۶
- شکل (۵-۲) نمای شماتیک چگالی حالات در یک سیم کوانتومی ۱۶
- شکل (۶-۲) نمای شماتیک چگالی حالات در یک چاه کوانتومی ۱۷
- شکل (۷-۲) یک سیم کوانتومی با پتانسیل نامحدود ۲۰
- شکل (۸-۲) نمودار انرژی مقید سیستم بر حسب اندازه ابعاد محدود در سیم کوانتومی ۲۲
- شکل (۹-۲) الگوی توزیع چگالی احتمال برای چهار حالت کوانتومی با کمترین مقدار انرژی ۲۲
- شکل (۱۰-۲) الگوی پتانسیل محدود سیم کوانتومی [۱۰] ۲۳
- شکل (۱۱-۲) انرژی مقید سیم کوانتومی محدود شده با دیواره های آلیاژی: ۲۴
- شکل (۱۲-۲) الگوی توزیع چگالی بار برای چهار حالت کوانتومی با کمترین مقدار انرژی ۲۵
- شکل (۱۳-۲) الگوی استوانه های سیم کوانتومی ۲۷
- شکل (۱۴-۲) نمودار انرژی مقید الکترون نسبت به اندازه شعاع سیم استوانه ای ۲۹
- شکل (۱-۳) نمای شماتیک امواج حاصل از پراکندگی در یک سیم دو بعدی ۳۴
- شکل (۲-۳) رابطه پراکندگی حالت های ورودی و محوشده در سیم شبه یک بعدی ۳۶
- شکل (۳-۳) احتمال عبور T_{11} بر حسب انرژی فرمی در طول یک تابع δ دافعه و یک تابع پراکندگی δ جاذبه در یک سیم دو بعدی ۴۴
- شکل (۴-۳) نمودار رسانندگی بر حسب انرژی فرمی در طول یک تابع δ دافعه و یک تابع پراکندگی δ جاذبه در یک سیم دو بعدی ۴۵
- شکل (۱-۴) نمودار رسانندگی به عنوان تابع انرژی در طول یک تابع پراکندگی δ جاذبه در یک سیم دو بعدی به ازای میدان مغناطیسی خارجی ۶۱
- شکل (۲-۴) احتمال عبور T_{11} به عنوان تابعی از موضع پراکننده در دستگاه الکترونی به ازای مقادیر مختلف اندازه میدان مغناطیسی به ازای $\gamma > 0$ ۶۳
- شکل (۳-۴) احتمال عبور T_{11} به عنوان تابعی از موضع پراکننده در دستگاه الکترونی به ازای مقادیر مختلف اندازه میدان مغناطیسی به ازای $\gamma < 0$ ۶۴
- شکل (۴-۴) احتمال عبور T_{11} بر حسب ω_c به ازای مقادیر مختلف y_i ۶۵
- شکل (۵-۴) احتمال عبور T_{11} بر حسب ω_c به ازای مقادیر مختلف y_i ۶۶

فصل اول

مقدمه

مقدمه

در سالهای اخیر، با توجه بر ضرورت کوچک سازی قطعات الکترونیکی و شناخت کامل رفتار منحصر بفرد این قطعات، نانو ساختارهای نیمرسانا تبدیل به دستگاه‌های مدل جهت تحقیق در زمینه ی رسانش الکتریکی و خواص مربوطه در مقیاس طول های کوچک گردیده اند.

بخش قابل توجهی از مطالعات به عمل آمده در خصوص نانو ساختارها مبتنی بر مطالعه رفتار گاز الکترونی در ساختارهای نیمه رسانا می باشد که از اهمیت ویژه ای در الکترونیک برخوردار است. این قبیل ساختارها را می توان به گونه ای ساخت که شامل لایه ی نازکی از الکترونهای با تحرک بالا باشند. تحت این شرایط حرکت در جهت عمود بر لایه ی مذکور کوانتیده است و لذا الکترون ها عملاً مقیدند که در یک صفحه حرکت کنند. به عنوان مثال ساختاری با آلایش مدوله بر ساختار چند لایه ای (نامتجانس) $\text{GaAs / Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ جهت ایجاد گاز الکترونی دو بعدی با تحرک بسیار زیاد ابداع گردید. بعلاوه با پیشرفت فناوری و روش های ساخت مواد ، انواع متعددی از ساختارهای نانو با ویژگیهای منحصر به فرد ایجاد شده است.

در سالهای اخیر ساختارهای نانوی نیم رساناها ، از موضوعات مورد علاقه محققان برای بررسی رسانندگی در مقیاس نانو بوده است. پیشرفت‌های اخیر در این رابطه با به دست آمدن مواد نیم رسانای خالص بی نظیر و کریستالهای کامل ، سرعت بیشتری یافته است. چنین موادی می توانند برای تولید ساختارهایی با ضخامت نا چیز با رسانش بالای الکترونی به کار روند. در این مواد حرکت در راستای عمود بر سطح ساختار ، به صورت کوانتومی و محدود است و از طرفی حرکت الکترون ها در سطح به راحتی صورت می گیرد. به عنوان یک مدل، گاز الکترونی دوبعدی (2DEG) شامل مجموعه-ای از ویژگی‌های منحصر به فرد است و در ساختار نا متجانس $\text{GaAs / Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ دارای چگالی الکترونی کمی است که می توانند با اعمال میدان الکتریکی نوسان کنند. چگالی کم باعث ایجاد طول موج فرمی بالایی (حدود ۴۰ نانومتر) می شود که در مقایسه با ابعاد نانو ساختارها قابل کاربری صنعتی

است. بنابراین، انتقال کوانتومی در یک گاز الکترونی دو بعدی به دلیل خواصی مانند طول موج فرمی بالا مورد مطالعه قرار می گیرد.

نانوساختارهای نیم رسانا به ما امکان مطالعه انتقال کوانتومی در حضور پتانسیل دلخواه را می دهد. در مطالعه این ویژگی که ترابرد بالستیک^۱ را نشان می دهد، پراکندگی توسط ناخالصی قابل چشم پوشی است. ویژگی های انتقال با توجه به هندسه دستگاه مورد بررسی قرار می گیرد. این رژیم ترابرد ، در فیزیک حالت جامد ، اپتیک الکترونی^۲ (برهم کنش نور و الکترون) نامیده می شود [1]. رابطه بین رسانش و انتقال الکترونی توسط فرمول لاندائور مشخص می شود [۲-۴]. سیستم های دو بعدی در یک میدان مغناطیسی عمودی قوی دارای حالت های الکترونی معروف به ترازهای لاندائو می باشند. [5]. ترابرد الکترونی در سیم های کوانتومی یکی از مسائل مهم نظری و تجربی برای دانشمندان در سال های اخیر بوده است [۶-۱۸]. در یک نانوسیم ایده آل ترابرد الکترونی به صورت بالستیک است و مقادیر $G_0 = 2e^2/h$ رسانندگی بصورت مضرب صحیحی از خواهند بود. [۱۹-۲۰]. به هر حال حضور ناخالصی ها و نقص ها در نانوسیم ها تحرک الکترون ها و رسانندگی ایده آل آنها را تحت تاثیر قرار می دهد [۱۹-۲۳].

مسئله مهم برای بررسی این موضوع چگونگی تاثیر این نقص ها و نوع پراکندگی الکترونی ایجاد شده در سیستم و چگونگی تاثیر ساختاری سیم کوانتومی بر دامنه پراکندگی است. [۲۱-۳۴] هرگاه انرژی فرمی با انرژی لبه پایینی زیر نوار برابر گردد، عبور کامل در هر دو حالت پتانسیل جاذبه و دافعه روی می دهد. کاهش در دامنه انتقال در حضور پتانسیل جاذبه شدیدتر خواهد بود. مساله پراکندگی الکترون در سیم کوانتومی دوبعدی با تابع نقص δ در مقالات زیادی با روش های مختلف بررسی شده است [۲۱-۲۴].

1- Ballistic transport

2- Electron optics

ون ویس^۳ و همکارانش ترابرد الکترونی در اتصال نقطه ای کوانتومی^۴ تعریف شده در دستگاه گاز الکترون دو بعدی را در غیاب میدان مغناطیسی مطالعه نمودند. آنها مشاهده کردند که با تغییر پهنای دستگاه $e^2/\pi h$ رسانش به صورت مضارب صحیحی از تغییر می کند. [17]

زافر و استون^۵ رسانش در یک قطعه مدل را که متشکل از دو اتصال نقطه ای و یک کاواک را بطور نظری بررسی کردند. آنها تغییرات بوجود آمده روی ترابرد الکترون را با تغییرات شکل و اندازه اجزاء دستگاه مورد مطالعه قرار دادند همچنین با در نظر گرفتن اثرات ناشی از پراکندگیهای الکترونی، حالت های منتهی به تداخل های سازنده و ویرانگر امواج الکترونی و شرایط بروز آنها را گزارش نمودند. [۱۹]

[سو و سوربلو^۶ رسانندگی کانالهای باریک در حضور ناخالصی را با در نظر گرفتن کانال به عنوان موجبر الکترونی محاسبه نموده و پاسخی تحلیلی برای رسانندگی با طرحی پلکانی بدست آوردند. آنها مشاهده کردند که برای پراکننده های بسیار قوی، بخشهای تخت طرح رسانندگی ناپدید می شوند. آنها ویژگیهای مشاهده شده را به پراکندگی های چند باره بین ناخالصی و دیواره های موجبر نسبت دادند. [۲۱]

بوئز^۷ و همکارانش موضوع آستانه تشدید های عبور و حالت های شبه مقید را در مسائل پراکندگی در کانال های متعدد در پتانسیل های یک بعدی وابسته به زمان و مسئله پراکندگی از ناخالصی منفرد در سیم شبه یک بعدی را مطالعه و شرایط بروز حالت های شبه مقید را بررسی نمودند. همچنین آنها خواص رسانش را در یک موجبر الکترونی دو بعدی با پراکننده همسانگردی که توسط تابع دلتای دیراک مدل سازی شده بود، با احتساب تعداد محدودی از مدها بررسی کردند. تشدیدهای مشاهده

3 - van wees

4 - Quantum point contact

5 - szafer and ston

6 - chu and sorbello

7- Boese

شده برحسب حالت های شبه مقید با استفاده از حل مستقیم معادله شرودینگر و تابع گرین توضیح داده شدند. [۲۵]

از طرفی وجود برخی ناخالصی ها در نانوساختارها ، باعث ایجاد پراکندگی های الکترونی و تغییر در انتقال الکترونی و در نتیجه رسانندگی دستگاه می شود. بررسی تاثیرات میدان مغناطیسی در حضور این ناخالصی ها بر تراورد الکترونی دستگاه از موضوعات مورد علاقه در این پایان نامه است.

این پایان نامه شامل چهار فصل می باشد. در فصل اول به ارائه مقدمه ای بر مطالعات و پژوهش های انجام شده در این زمینه می پردازیم و در فصل دوم، انواع نانو ساختار و کاربردهای آنها در فناوری بیان شده و رفتار انتقال الکترونی در نانوساختارها، مورد مطالعه قرار گرفته است. [۳۱-۳۳]

در این پایان نامه با در نظر گرفتن نقص شبکه و یا ناخالصی به صورت تابع پتانسیل دلتای دیراک به بررسی دستگاه می پردازیم. همان طور که گفته شد، سیستم در حضور و غیاب میدان مغناطیسی رفتارهای متفاوتی از خود نشان می دهد. بنابراین در فصل سوم، ابتدا رفتار پراکندگی را بدون حضور میدان مغناطیسی بررسی می کنیم و در ادامه، در فصل پایانی، با اعمال میدان مغناطیسی قوی، نحوه تغییرات رفتار سیستم و تاثیرات میدان مغناطیسی اعمالی را بر سیستمی مشابه سیستم معرفی شده فصل سوم مورد مطالعه قرار می دهیم.

نتایج حاصل از این مطالعات در پایان فصول ۳ و ۴ ارائه شده است. در پایان فصل چهارم نیز، در خصوص تاثیر میدان مغناطیسی اعمالی بر پراکندگی های الکترونی در سیستم مورد مطالعه بحث خواهد شد.

فصل دوم

ساختارهای نانو و

حالت های الکترونی در سیم کوانتومی

۱-۲ مقدمه

با توجه به پیشرفت های حاصل در فناوری و روش های سنتز مواد ، توانایی ساخت دستگاه های یک بعدی از قبیل نانو سیم ها ، با کاربردهای متفاوت ، پیشرفت چشمگیری داشته است. برحسب این که یک نانوسیم از چه چیزی ساخته شده باشد می توان خصوصیات یک عایق، یک نیمه رسانا ، یا یک رسانا را از خود نشان دهند.

در همین راستا مسائلی مانند ابررسانایی در سیستم های یک بعدی به دلیل وجود پدیده های بنیادی مثل تونل زنی کوانتومی میکروسکوپیک، ترابرد کوانتومی فازی و تاثیرات محیط دارای اهمیت بسیاری هستند [۶-۱۲].

یکی از موارد جالب برای بررسی تغییرات ترابرد الکترونی در سیستم های یک بعدی، اعمال میدان مغناطیسی به سیستم است. بنابراین برای کنترل و تنظیم چنین سیستم هایی می توان از میدان مغناطیسی و تاثیرات حاصل از آن استفاده کرد ، اما در مقایسه با این سیستم ها ، ابررساناهای یک بعدی (نانوسیم ها) دارای ویژگی متفاوتی هستند. این ویژگی عبارت از حضور همدوسی فاز در ابررسانای یک بعدی است. طبق مطالعات انجام شده، حضور میدان مغناطیسی می تواند باعث ایجاد تاثیرات مهمی بر نرخ ترابرد و دمای بحرانی نانوسیم ها شود و با کمک این ویژگی می توان به نحوه ترابرد الکترونی در یک نانوسیم با کمک میدان مغناطیسی اعمالی تسلط یافت و چگونگی عملکرد آن را کنترل کرد. [13-14]

در ادامه این فصل به مطالعه حالت های الکترونی در یک دستگاه گاز الکترونی تحت محدودیت کوانتومی خواهیم پرداخت و در فصل های آینده با پرداخت دقیق تر به تاثیرات میدان مغناطیسی در رفتار سیستم ، ترابرد الکترونی در ساختار مبتنی بر گاز الکترون دو بعدی ، پایان نامه را ادامه می دهیم.

۲-۲ تعریف نانو مواد و ساختارها

مواد نانو ساختار به لحاظ اهمیت اساسی و پتانسیل های کاربردی آنها در حوزه های مختلف فیزیک ، شیمی ، بیولوژی و علم مواد در سالهای اخیر مورد توجه قرار گرفته اند همچنین در حوزه تجهیزات الکترونیکی و نوری، کوچک سازی قطعات ، طیف گسترده ای از تحقیقات نانو فناوری را به خود اختصاص داده اند. اهمیت مقیاس نانو در تغییر خواص و ویژگی های مواد مانند استحکام، انعطاف پذیری، رسانایی الکتریکی، خواص مغناطیسی، واکنش پذیری و ... وابسته به ابعاد این مواد است. تغییر خواص مواد با کوچک سازی آن بیش از هر چیز به نوع ماده و خاصیت مورد نظر بستگی دارد. به عنوان مثال با کوچک شدن ابعاد یک ماده، عموماً برخی از خواص مکانیکی مواد مانند استحکام بهبود می یابد. این افزایش استحکام تنها در محدوده چند نانومتر اتفاق نمی افتد و ممکن است استحکام ماده ای چند ده و حتی صد نانومتری نیز بسیار بیشتر از ماده توده ای بزرگ مقیاس باشد. در نتیجه دانشمندان برای تعریف علم و فناوری نانو، به صورت قراردادی محدوده ۱ تا ۱۰۰ نانومتر را به عنوان محدوده نانومتری تعریف کرده اند. نانوساختارها طبقه جدیدی از مواد را ارائه داده اند که دارای خواص متفاوتی در مقایسه با انواع مولکولی و ساختارهای توده ای حالت جامد هستند . وجود اثرات کوانتومی، رفتار منحصر به فردی که می تواند در قطعات جدید الکترونیکی، نوری، مغناطیسی و ترموالکتریکی مورد استفاده قرار گیرد را تشدید می کند .ساختارهای متعدد چاه کوانتومی ، جهت تمرکز مطالعات درسیستم های نانویی از شانس بیشتری برخوردارند .در این سیستم ها دستگاه های کاربردی به دو بعد محدود شده اند .در مقایسه، انتظار می رود نقاط کوانتومی صفر بعدی و نانوسیم های یک بعدی، حتی اثرات کوانتومی قوی تری نیز داشته باشند . شاید بتوان گفت نانوسیم ها بیشترین سهم را جهت ساخت قطعات الکترونیکی جدید دارا می باشند چرا که آنها نسبت به ساختارهای دو بعدی، اثرات کوانتومی چشمگیرتری را از خود نشان داده و برخلاف اکثر سیستم های صفر بعدی ،پیوستگی خواص انتقالی خود را در طول محور سیم حفظ می کنند.

در حالت عادی، مواد، ساختار سه بعدی دارند. حال اگر حداقل یکی از این ابعاد در مقیاس نانو باشد (بین ۱ تا ۱۰۰ نانومتر) به این ماده، یک ماده نانوساختار گفته می شود. همچنین به بعدی که در مقیاس نانو نباشد اصطلاحاً بعد آزاد گفته می شود.

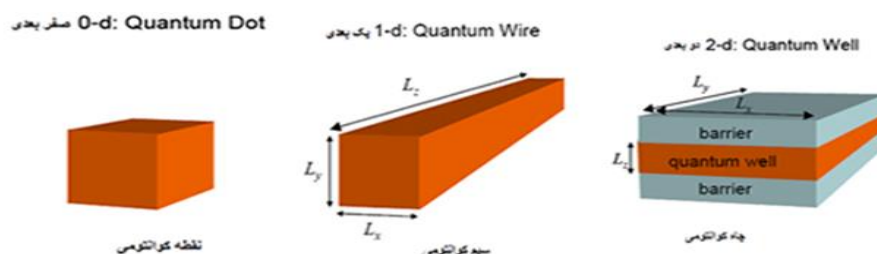
۳-۲ طبقه بندی انواع نانو ساختارها بر اساس تعداد ابعاد آزاد

در شکل (۱-۲)، برخی از انواع نانو ساختارها نشان داده شده است. نانوساختارها بر اساس تعداد ابعاد آزاد به دسته های زیر تقسیم می شوند.

۱-۳-۲ نانومواد صفر بعدی

موادی که در هر سه بعد دارای اندازه ی نانومتری می باشند و هیچ بعد آزادی ندارند. بر اساس برخی دسته بندی ها به این دسته از نانوساختارها، نانو ذرات نیز گفته می شود. عوامل تاثیرگذار بر خواص نانو ذرات، اندازه و جنس

ذرات هستند. نانوذرات کاربردهای مختلفی در صنایع مختلف مانند اتومبیل (ضد خش کردن بدنه، ضد بخار کردن شیشه ها، لاستیک های مقاوم و...)، پزشکی (ساخت دارو های جدید، تشخیص علائم بیماری ها و ...)، تصفیه آب و فاضلاب، الکترونیک، صنایع نظامی و... دارند. نانو ذرات می توانند بسته به کاربردشان در اشکال مختلف مانند کروی، بیضوی، مکعبی، منشوری، ستونی و... ساخته شوند. نانوذرات ممکن است از یک جزء تشکیل شده باشند یا اینکه ترکیبی از چند جزء (ماده) باشند. همچنین نانوذرات می توانند به صورت خالص و یا ترکیبی از چند ماده مختلف باشند.



شکل (۱-۲): انواع نانوساختارها بر حسب تعداد ابعاد آزاد [۳۵]

۲-۳-۲ نانومواد تک بعدی

نانو مواد تک بعدی دارای دو بعد در مقیاس نانو و یک بعد آزاد می باشند. نانو سیم ها، نانو میله ها، نانو لوله ها، نانو الیاف همگی جز مواد نانو ساختار تک بعدی می باشند. عوامل تاثیرگذار روی خواص نانو ساختارهای تک بعدی، جنس و نسبت طول به قطر (L/d) آن می باشند. مهم ترین ویژگی نانو ساختارهای تک بعدی فلزی هدایت الکتریکی آنها در راستای محور سیم است. نانوسیم ها کاربرد های زیادی در بخش های مختلف مانند ساخت رایانه های بسیار کوچک با سرعت بسیار بالا، ساخت لیزرهای بسیار کوچک، تشخیص بیماری ها، حافظه های منطاطیسی و ... دارند. نانو سیم ها نیز می توانند به صورت خالص و یا ترکیبی از چند نوع ماده مختلف باشند.

۳-۳-۲ نانو مواد دو بعدی

این مواد دارای دو بعد آزاد و یک بعد در مقیاس نانو می باشند. مواد با یک بعد در مقیاس نانو عمدتاً شامل لایه های نازک یا پوشش های سطحی می باشد. عوامل تاثیرگذار در خواص نانو پوشش ها، جنس و ضخامت آنها می باشد. نانوپوشش ها لایه هایی با ضخامت ۱ تا ۱۰۰ نانو متر هستند که به صورت پوشش روی مواد دیگر قرار می گیرند و باعث تغییر خواص و ویژگی های آنها می شوند. لایه های نازک نیز می توانند به صورت خالص و یا ترکیبی از چند ماده مختلف باشند .

۴-۳-۲ نانو مواد سه بعدی

یعنی هر سه بعد آنها در مقیاس آزاد است. همانطور که مشاهده می کنید این تعریف با تعریف مواد نانو ساختار در تناقض است، زیرا هیچ یک از سه بعد آن در مقیاس نانو نیست. این دسته شامل نانوکامپوزیت ها (مواد مرکبی که شامل چند ماده است) و مواد حجیم نانو ساختار (یا مواد توده ای نانو ساختار) می باشد. مواد حجیم نانو ساختار موادی هستند که اندازه واحدهای سازنده مجزای آنها حداقل در یک بعد کمتر از ۱۰۰ نانومتر باشد. بعضی مواد یک سری خواص را ندارند. برای

مثال پلاستیک خاصیت رسانایی الکتریکی ندارد. اما اگر ماده‌ای همانند ذرات فازی که خاصیت رسانایی دارند را به آن اضافه کنیم، ماده مخلوط تولید شده می‌تواند خاصیت رسانایی داشته باشد. به این مواد کامپوزیت یا ماده مرکب گفته می‌شود. ماده مرکب ممکن است از بیش از دو ماده تشکیل شده باشد که هر یک از مواد اضافه شده می‌تواند قابلیت تقویت یکی از خواص را داشته باشد. در صورتی که حداقل یکی از اجزای کامپوزیت نانوساختار باشد، به آن نانوکامپوزیت می‌گوییم. به عنوان مثال می‌توان رسانایی پلیمرها را با استفاده از نانولوله‌های کربنی افزایش داد.

۴-۲ گاز الکترون دو بعدی

بررسی گاز الکترون دوبعدی، تحت تاثیر میدان مغناطیسی یکی از پدیده های جالب در فیزیک ماده چگال است.

دینامیک گاز الکترونی آزاد تحت تاثیر میدان مغناطیسی در دیدگاه کلاسیکی یک حرکت سیکلوترونی است.

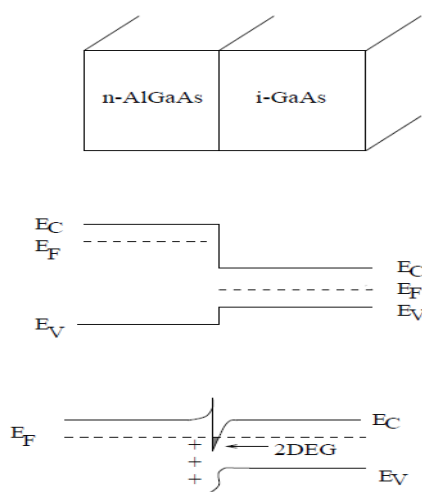
در تصویرکوانتومی، کوانتش حرکت الکترون در جهت عمود بر صفحه میدان مغناطیسی منجر به تبدیل طیف ویژه مقادیر انرژی گاز الکترونی از حالت پیوسته به گسسته، متناظر با ترازهای لاندائو می‌باشد.

یک روش معمول در ایجاد گاز الکترون دو بعدی، استفاده از ساختارهای نا همگون از قبیل AlGaAs/GaAs است. در چنین ساختارهایی در سطح مشترک دو محیط نا همگون، حرکت الکترون ها در جهت عمود بر سطح، کوانتیده و دشوار است در حالی که حرکت الکترون ها در سطح مشترک آزادانه اتفاق می افتد.

از ویژگیهای دستگاههای گاز الکترون دو بعدی مورد توجه، داشتن چگالی الکترونی پایین است که با تغییر در میدان الکتریکی خارجی می تواند متغیر باشد.

در یک ساختار ناهمگون $\text{AlGaAs} - \text{GaAs}$ وقتی نوار رسانش و نوار ظرفیت در جهت عمود بر سطح مشترک دو ماده و در تماس با هم قرار می گیرند، چون گاف نواری AlGaAs از گاف مربوط به GaAs پهن تر است، با تغییر میزان آرایش می توان تراز فرمی را به ناحیه گاف نواری ممنوعه منتقل نمود. افزایش پتانسیل الکتروستاتیکی در سطح مشترک دو ماده، موجب خمیده شدن نوارها می شود. در حالت تعادل، انرژی فرمی در همه جا ثابت است

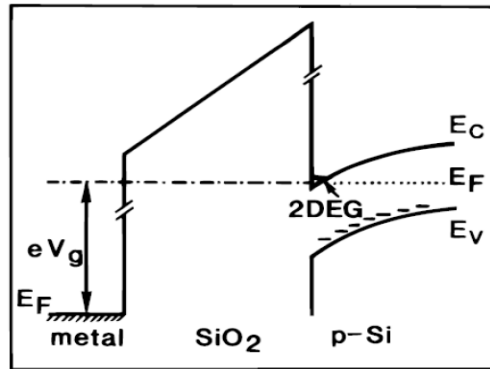
تحت این شرایط چگالی الکترون در سطح مشترک دو قطعه افزایش ناگهانی می یابد که به آن گاز الکترون دو بعدی (2-DEG) می گویند.



شکل (۲-۲) ترتیب نوار رسانش و نوار ظرفیت در پیوند بین GaAs و AlGaAs

آنچه که باعث می شود (2-DEG) در GaAs بسیار خاص باشد، رسیدن به نرخ بسیار پایین پراکندگی است.

قابلیت تحرک در دماهای پایین، معیار مستقیمی از زمان واهلش تکانه است زیرا با ناخالصی و نقایص محدود می شود.



شکل (۳-۲) ارتباط بین نوار رسانش و نوار ظرفیت و سطح انرژی فرمی با ساختار MOS [۳۵]

۵-۲ سیم کوانتومی

شاید هنوز ساخت تراشه های کامپیوتری که برای ایجاد سرعت محاسباتی بالا به جای جریان الکتریسته از نور استفاده می کنند، تشخیص انواع سرطان و سایر بیماریهای پیچیده فقط با گرفتن یک قطره خون، بهبود و اصلاح کارت های هوشمند و نمایشگرهای LCD ؛ تنها یک رویا برآید باشد و این مسائل را غیر واقعی جلوه دهد اما محققین آینده قادر خواهند بود تمام این رویاها را به حقیقت تبدیل کنند و دنیایی جدید از ارتباطات و تکنولوژی را بواسطه معجزه سیم های کوانتومی به ارمغان آورند.

عموماً سیم به ساختاری گفته می شود که در یک جهت (جهت طولی) گسترش داده شده باشد و در دو جهت دیگر بسیار محدود شده باشد. یک خصوصیت اساسی از این ساختارها که دارای دو خروجی می باشند رسانایی الکتریکی می باشد. با اعمال اختلاف پتانسیل الکتریکی در دو انتهای این ساختارها و در امتداد طولی شان انتقال بار الکتریکی اتفاق می افتد.

ساخت سیم هایی در ابعاد نانومتری هم از جهت تکنولوژیکی و هم از بعد نظری بسیار مورد علاقه می باشد، زیرا در ابعاد نانومتری خواص غیر معمولی از خود بروز می دهند. نسبت طول به قطر نانوسیم ها بسیار بالا می باشد ($L > D$) .

همچنین می توان با ایجاد محدودیت عرضی کوانتومی در دستگاههای گاز الکترون دو بعدی ، سیم کوانتومی با مشخصات مورد علاقه ایجاد نمود.

۶-۲ چگالی حالت های الکترونی در انواع نانوساختارها

از آنجا که تعداد حالت های الکترونی در یک نوار الکترونی (رسانش یا ظرفیت) بسیار زیاد است ، برای بیان تعداد این حالت ها از مفهوم چگالی حالات استفاده می شود. چگالی حالات بیانگر تعداد حالت هایی است که انرژی آنها بین E , $E + dE$ است. به عبارتی تعداد حالات در دسترس در واحد انرژی ، چگالی حالات نام دارد. چگالی حالت ها برای یک سیستم ، با توجه به درجات آزادی آن متفاوت است .

با استفاده از رابطه $g(\epsilon) = \frac{dN}{dE}$ چگالی حالت ها برای نانوساختارهای سه بعدی (3D) متناسب با $E^{1/2}$ ، برای چاه کوانتومی (2D) مستقل از انرژی و برای سیم کوانتومی (1D) متناسب با $E^{-1/2}$ است که در شکل های زیر نشان داده شده است.

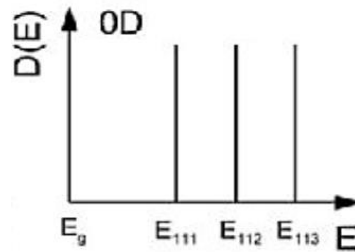
۱-۶-۲ چگالی حالت مواد صفر بعدی :

در مورد نقاط کوانتومی ، هنگامی که ذرات در همه جهات محبوس شده اند ، چگالی حالت ها فقط به تعداد ترازهای محبوس شده بستگی دارد. بنابراین چگالی حالت نقاط کوانتومی براساس تابع دلتای دیراک خواهد بود.

$$g(\varepsilon) \propto \delta(\varepsilon - \varepsilon_0)$$



Quantum Dot



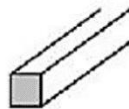
شکل (۲-۴) نمای شماتیک چگالی حالات در یک نقطه کوانتومی [۳۷]

۲-۶-۲ چگالی حالت مواد یک بعدی :

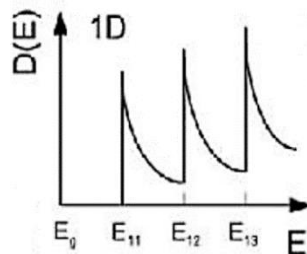
چگالی حالت عبارت است از تعداد حالت‌هایی که دارای مقادیر خاصی از انرژی هستند. به طوری که این کمیت در یک بعد به صورت زیر محاسبه می‌شود:

$$g^{1d}(\varepsilon) \propto \frac{1}{\sqrt{\varepsilon}}$$

پس می‌توان گفت در یک نانو سیم چگالی حالت‌ها با $1/\sqrt{\varepsilon}$ تناسب دارد.



Quantum Wire



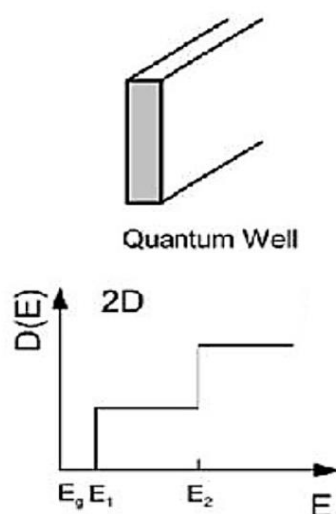
شکل (۲-۵) نمای شماتیک چگالی حالات در یک سیم کوانتومی [۳۷]

۳-۶-۲ چگالی حالت مواد دو بعدی :

در $K_B T \ll E_f$ یک زیر تراز معین ، چگالی دو بعدی تابع حالت ها مستقل از انرژی است. از آنجا که زیر ترازهای زیادی ممکن است در پتانسیل محدود شده وجود داشته باشد ، چگالی کل حالت ها بصورت مجموعه ای از پله هاست (مطابق شکل) در دمای پایین تمامی حالت ها تا سطح فرمی پر شده است. به علت مستقل بودن چگالی حالت ها ، چگالی الکترون در سطح در انرژی فرمی بر اساس رابطه زیر می باشد.

$$g^{2D}(\epsilon) = m^* / \pi \hbar^2 \theta(\epsilon - \epsilon_{n_z})$$

که در آن m^* جرم موثر الکترون و n تعداد حالت هاست.



شکل (۶-۲) نمای شماتیک چگالی حالات در یک چاه کوانتومی [۳۷]

۷-۲ ترابرد کوانتومی در یک سیستم یک بعدی

برای بررسی حالتهای الکترونی در یک سیستم یک بعدی و به طور خاص تر در یک سیم کوانتومی باید رفتار الکترون (حفره) را با استفاده از معادله شرودینگر بررسی کرد. در این بخش حالت های الکترونی را برای دو نوع سیم کوانتومی با مقطع مستطیلی و دایره ای بررسی خواهیم کرد.

۲- ۷- ۱ معادله‌ی شرودینگر در سیم‌های کوانتومی

همان‌طور که گفته شد، برای محاسبه رفتار الکترون (حفره) در یک سیم کوانتومی از معادله شرودینگر بهره می‌گیریم. معادله‌ی شرودینگر برای یک جرم موثر ثابت در سه بعد برابر عبارت است از:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) + V(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (1-2)$$

تعریف جرم موثر: الکترون‌ها در شبکه بلوری آزاد نیستند و تحت تاثیر نیروهای وارد از سوی یونهای شبکه بلوری قرار دارند. بنابراین حرکت الکترون با حرکت الکترون آزاد متفاوت خواهد بود. می‌توان حرکت الکترون‌ها را مشابه حرکت ذره آزادی تصور کرد که جرم آن با جرم الکترون آزاد متفاوت است این جرم فرضی را جرم موثر می‌گویند. با این فرض از به حساب آوردن مجدد نیروهای وارد از سوی شبکه بلوری به الکترون بی‌نیاز

خواهیم شد.

$$E = \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} \frac{p^2}{m} = \frac{\hbar^2}{2m} k^2 \Rightarrow \frac{d^2 E}{dk^2} = \frac{\hbar^2}{m} \Rightarrow \boxed{\bar{m}^* = \frac{\hbar^2}{\frac{d^2 E}{dk^2}}}$$

رابطه جرم موثر :

با توجه به ساختار درونی سیم کوانتومی، می‌توان تابع پتانسیل را به دو بخش تقسیم کرد:

$$V(x, y, z) = V(x) + V(y, z) \quad (2-2)$$

و همچنین ویژه‌حالت‌ها را نیز به دو بخش فضایی تقسیم می‌کنیم:

$$\psi(x, y, z) = \psi(x) \psi(y, z) \quad (3-2)$$

حال دو معادله (۳-۲) و (۲-۲) را در معادله (۱-۲) قرار می‌دهیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi(x) \psi(y, z) + [V(x) + V(y, z)] \psi(x) \psi(y, z) = E \psi(x) \psi(y, z) \quad (۴-۲)$$

اگر انرژی را هم به دو قسمت تقسیم کنیم، خواهیم داشت:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(y, z) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) + \psi(y, z) V(x) \psi(x) + \psi(x) V(y, z) \psi(y, z) = (E_x + E_{y,z}) \psi(x) \psi(y, z) \quad (۵-۲)$$

به این ترتیب معادله‌ی شرودینگر به دو بخش تفکیک می‌شود:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \psi(y, z) \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + \psi(y, z) V(x) \psi(x) = \psi(y, z) E_x \psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(x) \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \psi(x) \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) + \psi(x) V(y, z) \psi(y, z) = (E_{y,z}) \psi(x) \psi(y, z) \end{cases} \quad (۶-۲)$$

همان‌طور که اشاره شد، در سیم کوانتومی حرکت ذره در دو بعد محدود و در یک بعد آزاد است و ما

فرض می‌کنیم حرکت ذره در سیم مورد نظر ما در جهت $\bar{x}$ آزاد است. حال دو معادله (۵-۲) را با

فرض اینکه $V(x) = 0$ است، بازنویسی می‌کنیم:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} = E_x \psi(x) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) + V(y, z) \psi(y, z) = E_{y,z} \psi(y, z) \end{cases} \quad (۷-۲)$$

بنابراین تابع موج آن به صورت یک ذره آزاد خواهد بود و با توجه به دو معادله (۶-۲) حرکت در جهت

$\bar{x}$ بصورت موج تخت نشان داده می‌شود:

$$\psi(x) = A \exp(ik_x x) \quad (۸-۲)$$

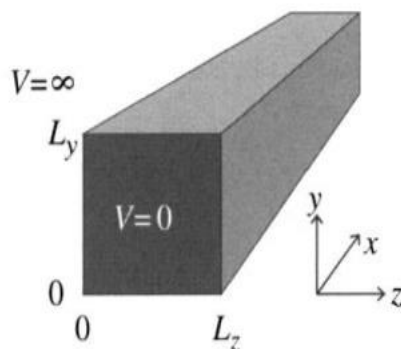
که در آن k_x عدد موج A ثابت بهنجارش است. همچنین انرژی سیستم در این حالت برابر است با:

$$E_x = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} \quad (9-2)$$

در ادامه به حل معادله دوم در رابطه (۷-۲) که یک معادله دوبعدی شرودینگر است، می‌پردازیم. برای حل این معادله از روش جداسازی مولفه‌ها استفاده می‌کنیم و با به کار بردن شرایط مرزی، ویژه مقادیر و ویژه حالت‌های سیستم را به دست می‌آوریم. با توجه به این که پاسخ معادلات شرودینگر وابسته به شکل هندسی سیستم است، معادله‌ی شرودینگر را برای سه نوع مختلف سیم کوانتومی در سه بخش پیش‌رو حل می‌کنیم.

۲-۷-۲ سیم مستطیلی نامحدود

با توجه به شکل (۷-۲) تابع پتانسیل به شکل زیر خواهد بود:



شکل (۷-۲) یک سیم کوانتومی با پتانسیل نامحدود

$$V(y, z) = \begin{cases} 0 \rightarrow (0 < y, z < L_y, L_z) \\ \infty \rightarrow elsewhere \end{cases} \quad (10-2)$$

معادله شرودینگر را در محدوده $0 < y, z < L_y, L_z$ حل می‌کنیم:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(y, z)}{\partial z^2} \right) = E_{y, z} \psi(y, z) \quad (11-2)$$

از جداسازی متغیرها و یک سری عملیات جبری که در بخش قبلی هم اشاره شد، به دو معادله کلی

به شکل زیر می‌رسیم:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} \right) = E_y \psi(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right) = E_z \psi(z) \end{cases} \quad (12-2)$$

با توجه به این دو معادله، ویژه مقادیر و ویژه حالت‌های ذره درون سیم در جهت‌های z, y به

دست می‌آید:

$$\begin{cases} \psi(y) = \sqrt{\frac{2}{L_y}} \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L_y}\right) \\ \psi(z) = \sqrt{\frac{2}{L_z}} \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L_z}\right) \end{cases} \quad (13-2)$$

$$\begin{cases} E_y = \frac{\hbar^2 n_y^2 \pi^2}{2m L_y^2} \\ E_z = \frac{\hbar^2 n_z^2 \pi^2}{2m L_z^2} \end{cases} \quad (14-2)$$

بنابراین با توجه به روابط بالا و روابط (۱۰-۲) و (۱۱-۲) انرژی کل و تابع موج کل سیستم به صورت

زیر است:

$$E_T = E_x + E_y + E_z = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left(\frac{k_x^2}{\pi^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right) \quad (15-2)$$

و تابع موج کل:

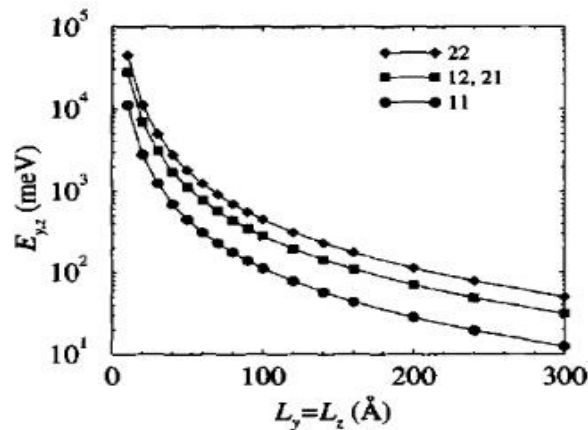
$$\psi(x, y, z) = A \exp(ik_x x) \frac{2}{\sqrt{L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L_z}\right) \quad (16-2)$$

همان طور که می‌بینید، حالت‌های مقید سیم‌های کوانتومی وابسته به دو عدد کوانتومی اصلی n_z و

n_y هستند. شکل (۸-۲) نمودار انرژی‌های مقید در حالت‌های $E_{y,z}$ را برای چهار حالت ممکن

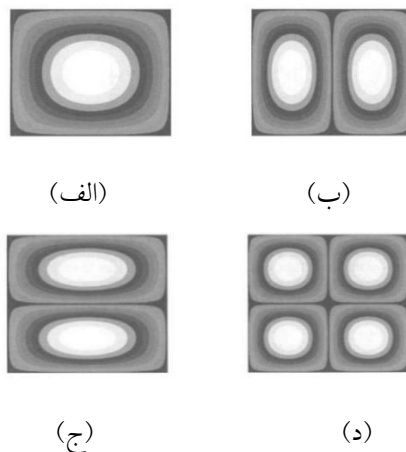
(n_y, n_z) نشان می‌دهد. مشاهده می‌شود که یک تبهگنی بین حالت‌های (۱و۲)، (۲و۱) نسبت به

مقادیر مختلف $L_y = L_z$ برقرار است از طرفی می‌بینیم که با کاهش اندازه ابعاد سیم کوانتومی، ویژه مقادیر انرژی سیستم که معرف انرژی کف زیر نوارهای سیستم نیز می‌باشد، در حال افزایش است.



شکل (۸-۲) نمودار انرژی مقید سیستم بر حسب اندازه ابعاد محدود در سیم کوانتومی [۱۱]

چگالی احتمال برای یک ذره مقید درون سیم کوانتومی، دارای مقداری حقیقی است و برابر $|\psi(y)\psi(z)|^2$ است. در شکل (۹-۲) چگالی احتمال برای کمترین حالت‌های مقید در یک الگوی گرافیکی با توزیع فضایی چگالی بار، وابسته به اعداد کوانتومی n_y و n_z داده شده است.

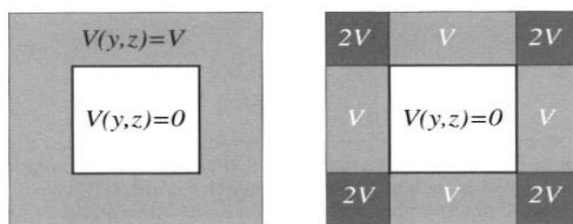


شکل (۹-۲) الگوی توزیع چگالی احتمال برای چهار حالت کوانتومی با کمترین مقدار انرژی [۱۱]

$$\text{حالت (الف): } \begin{cases} n_y = 1 \\ n_z = 1 \end{cases} \quad \text{حالت (ب): } \begin{cases} n_y = 1 \\ n_z = 2 \end{cases} \quad \text{حالت (ج): } \begin{cases} n_y = 2 \\ n_z = 1 \end{cases} \quad \text{حالت (د): } \begin{cases} n_y = 2 \\ n_z = 2 \end{cases}$$

۲-۷-۳ سیم مستطیلی محدود

به منظور نزدیک شدن محاسبات نظری به تجربه، فرض می‌کنیم پتانسیل سیم مستطیلی در کناره-های سیم دارای مقادیر محدود باشد. فرض می‌کنیم پتانسیل در کناره‌های سیم مانند شکل (۲-۱۰) باشد.



(ب)

(الف)

شکل (۲-۱۰) الگوی پتانسیل محدود سیم کوانتومی [۱۰]
الف) تقریب پتانسیل دیواره‌ها برای جفت شدگی حرکتی. ب) تقریب ساده پتانسیل دیواره‌ها

حال برای حل مسئله دوباره از معادله (۲-۶) شروع می‌کنیم. بنابراین پتانسیل $V(y, z)$ را به صورت

جمع‌ی از دو پتانسیل $V(y)$ و $V(z)$ می‌نویسیم.

می‌توانیم تقریب مورد نظر را که در کناره‌های بیرونی سیم در نظر گرفته می‌شود، به عنوان یک اثر

اختلالی در نظر بگیریم. فرض می‌کنیم پتانسیل و تابع موج به شکل زیر باشد:

$$\begin{cases} V(y, z) = V(y) + V(z) \\ \psi(y, z) = \psi(y)\psi(z) \end{cases} \quad (۲-۱۷)$$

بنابراین معادله شرودینگر (۲-۷) به صورت زیر در می‌آید:

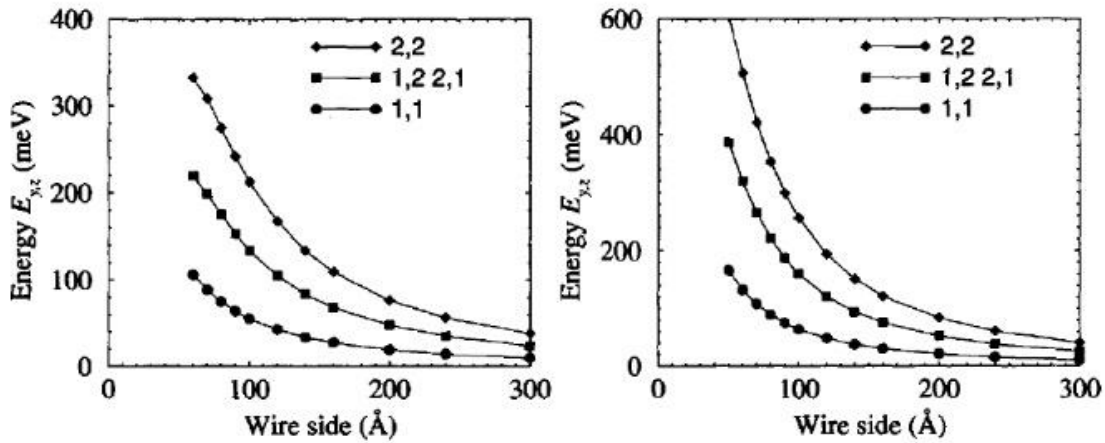
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\psi(z) \frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} + \psi(y) \frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right) + [V(y) + V(z)] \psi(y)\psi(z) = (E_{y,z}) \psi(y)\psi(z) \quad (۲-۱۸)$$

معادله را به دو معادله‌ی مستقل تفکیک می‌کنیم:

$$\begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(y)}{\partial y^2} \right) + [V(y)] \psi(y) = (E_y) \psi(y) \\ -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(z)}{\partial z^2} \right) + [V(z)] \psi(z) = (E_z) \psi(z) \end{cases} \quad (۱۹-۲)$$

حال جواب‌های این دو معادله دیفرانسیل را به کمک حل عددی به دست می‌آوریم. شکل (۲-۱۱)

جواب‌های به دست آمده از این حل را در یک نمودار برای دو ماده متفاوت نشان داده است [۱۰].



(ب)

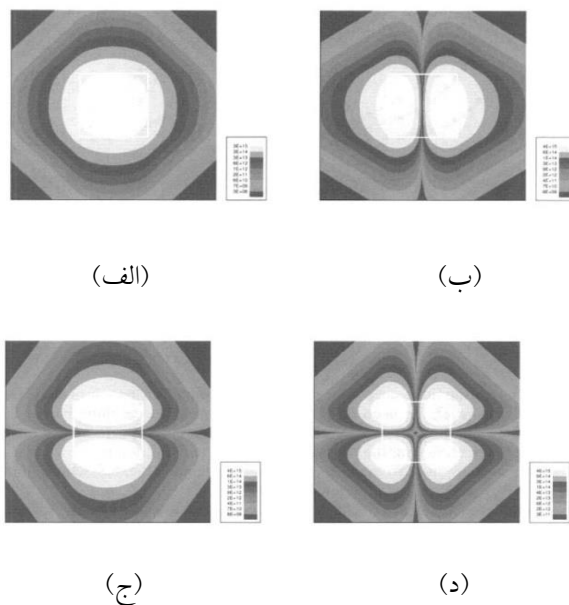
(الف)

شکل (۲-۱۱) انرژی مقید $E_{y,z} = E_y + E_z$ سیم کوانتومی محدود شده با دیواره‌های آلیاژی: الف) $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$

ب) $Ga_{0.6}Al_{0.4}As$ [۱۰]

در شکل (۲-۱۱) انرژی پایه سیستم در حالت (۱،۱) برچسب زده شده است. همچنین بقیه حالت‌ها در نمودار مربوط به ترکیب‌های بین دو حالت با کمترین انرژی (۱،۲)، (۲،۲) و (۲،۱) است. رفتار انرژی در کنار سیم مشابه نمونه سد پتانسیل نامحدود است. بین انرژی‌های (۱،۲) و (۲،۱) تبهگنی وجود دارد، به طوری که ترازهای انرژی مشابه‌اند و با افزایش فاصله دیواره‌های سیم کاهش می‌یابند.

در شکل (۲-۱۲) چگالی بار برای چهار نوع ویژه حالت رسم شده است. رفتار چگالی بار در این نمونه هم دارای توزیعی مشابه با نمونه نامحدود (بینهایت)^۸ است. به هر حال، تفاوت اصلی، در هر حالت تفاوت اصلی در حدود آن است که ارتفاع محدود سد امکان نشت کردن قابل توجه تابع موج به محیط اطراف را تفسیر می‌کند.



شکل (۲-۱۲) الگوی توزیع چگالی بار برای چهار حالت کوانتومی با کمترین مقدار انرژی. [۱۰]

$$\text{حالت (الف): } \begin{cases} n_y = 1 \\ n_z = 1 \end{cases} \text{ حالت (ب): } \begin{cases} n_y = 1 \\ n_z = 2 \end{cases}, \text{ حالت (ج): } \begin{cases} n_y = 2 \\ n_z = 1 \end{cases} \text{ و حالت (د): } \begin{cases} n_y = 2 \\ n_z = 2 \end{cases}$$

برای یک سیم با ابعاد $(100\text{\AA} \times 100\text{\AA})$ ، الگوی توزیع چگالی بار در حالت پایه مطابق شکل (۲-۱۲) نشان می‌دهد.

که به طور تقریبی در حدود $(80-90)$ درصد چگالی بار در درون سیم محدود می‌ماند. بنابراین تاثیرات پتانسیل تقریبی در بیرون سیم قابل نظر است. این تقریب برای حالت‌هایی با انرژی بالا

⁸ Infinitely deep

نامناسب است و تنها برای محدوده‌ی حالت‌هایی با انرژی پایین قابل استفاده است. برای کسب نتیجه دقیق‌تر، باید معادله شرودینگر را به صورت کامل محاسبه کرد [۱۳-۱۵].

ویژه مقادیر $E_{y,z}$ را می‌توان با در نظر گرفتن نظریه اختلال در سیستم دوبعدی بهبود بخشید. با استفاده از تئوری اختلال مرتبه اول، تغییر انرژی یک حالت به صورت زیر خواهد بود:

$$\Delta E = \langle \psi(y, z) | V'(y, z) | \psi(y, z) \rangle \quad (20-2)$$

$$\longrightarrow \Delta E = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(y) \psi^*(z) V'(y, z) \psi(y) \psi(z) dy dz$$

پتانسیل اختلالی ممکن است منفی باشد، با توجه به شکل (۲۰-۱) (الف) پتانسیل را به صورت زیر تقریب می‌زنیم:

$$V'(y, z) = -4V \quad (21-2)$$

با این فرض معادله (۲۰-۲) به صورت زیر در می‌آید:

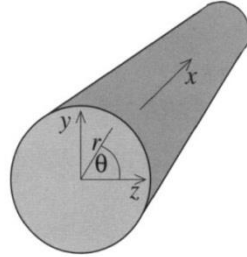
$$\Delta E = -4V \int_{L_y}^{\infty} \psi^*(y) \psi(y) dy \int_{L_z}^{\infty} \psi^*(z) \psi(z) dz \quad (22-2)$$

معادله‌ی (۲۲-۲) تقریبی خوب و قابل حل برای به دست آوردن ویژه مقادیر انرژی در یک سیم کوانتومی است [۱۰].

۴-۷-۲ سیم استوانه‌ای

در این بخش با این فرض که سیم مورد نظر استوانه‌ای باشد، به حل معادله شرودینگر می‌پردازیم. شکل (۲-۱۳) سیمی استوانه‌ای را نشان می‌دهد که حامل بار (الکترون یا حفره) در امتداد محور آن آزادانه حرکت می‌کند و در جهات دیگر محدود است. همان طور که در بخش‌های قبلی اشاره شد، معادله شرودینگر در جهات محدود شده به صورت زیر است:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(y,z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(y,z)}{\partial z^2} \right) + V(y,z) \psi(y,z) = E_{y,z} \psi(y,z) \quad (23-2)$$



شکل (۲-۱۳) الگوی استوانه‌ای سیم کوانتومی

می‌توانیم معادله شرودینگر را در مختصات استوانه‌ای بنویسیم.

بنابراین تابع موج $\psi(y,z)$ به صورت تابعی از r و θ در می‌آید. با توجه به اینکه در سیم مورنظر پتانسیل شعاعی است، بنابراین تابع موج نیز تنها به صورت تابعی از r خواهد بود:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial^2}{\partial r^2} \right) \psi(r) + V(r) \psi(r) = E_r \psi(r) \quad (24-2)$$

برای حل این معادله از روشی متکی بر تعریف حدی تابع مشتق استفاده می‌شود:

$$\begin{cases} \frac{\partial}{\partial r} \psi(r) = \frac{\psi(r+\delta r) - \psi(r-\delta r)}{2\delta r} \\ \frac{\partial^2}{\partial r^2} \psi(r) = \frac{\psi(r+\delta r) - 2\psi(r) + \psi(r-\delta r)}{(\delta r)^2} \end{cases} \quad (25-2)$$

با قرار دادن معادله (24-2) در (23-2) به معادله زیر می‌رسیم:

$$\frac{1}{r} \left[\frac{\psi(r+\delta r) - \psi(r-\delta r)}{2\delta r} \right] + \frac{\psi(r+\delta r) - 2\psi(r) + \psi(r-\delta r)}{(\delta r)^2} = \frac{2m}{\hbar^2} [V(r) - E_r] \psi(r) \quad (26-2)$$

حال دو طرف معادله را در $2r(\delta r)^2$ ضرب می‌کنیم و بر حسب عبارات $\psi(r)$ و $\psi(r-\delta r)$

$$\psi(r+\delta r)$$

جداسازی می‌کنیم:

$$(2r+\delta r)\psi(r+\delta r)=2r\left[(\delta r)^2\frac{2m}{\hbar^2}[V(r)-E_r]+2\right]\psi(r)+(-2r+\delta r)\psi(r-\delta r) \quad (27-2)$$

و معادله را به شکل زیر می‌نویسیم:

$$\psi(r+\delta r)=\frac{2r\left[(\delta r)^2\frac{2m}{\hbar^2}[V(r)-E_r]+2\right]\psi(r)+(-2r+\delta r)\psi(r-\delta r)}{(2r+\delta r)} \quad (28-2)$$

این معادله بر اساس شرایط مرزی استاندارد $\begin{cases} \psi(r) \rightarrow 0 \\ r \rightarrow \infty \end{cases}$ قابل حل است.

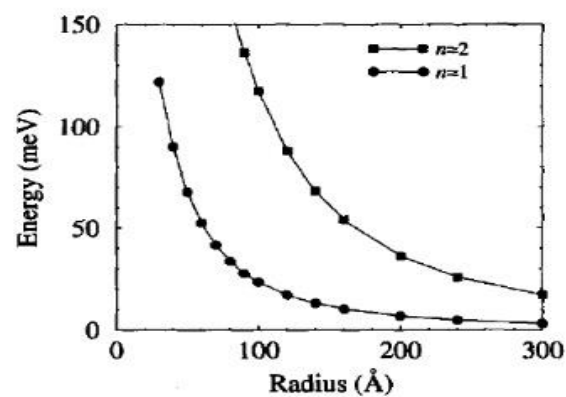
در مناطقی با پتانسیل ثابت، توابع موج در حالت کلی در جهت محور استوانه (جهت x) پیوسته هستند و بنابراین مشتق تابع موج در حین عبور از محور سیم باید صفر باشد که نشانگر نقاط بیشینه و کمینه موضعی است. این موضوع موجب می‌شود که شرایط اولیه تکراری^۹ به صورت زیر انتخاب شوند:

$$\begin{cases} \psi(0)=1 \\ \psi(\delta r)=1 \end{cases} \quad (29-2)$$

شکل (۲-۱۴) نسبت انرژی بستگی الکترون (با جرم موثر ثابت) به شعاع نانوسیم را برای یک

نانوسیم $GaAs$ که به وسیله آلیاژ $Ga_{0.8}Al_{0.2}As$ احاطه شده است، نشان می‌دهد.

⁹ Iterative starting conditions



شکل (۲-۱۴) نمودار انرژی مقید الکترون نسبت به اندازه شعاع سیم استوانه‌ای [۱۲].

همان‌گونه که انتظار می‌رفت، با افزایش شعاع، انرژی بستگی کاهش می‌یابد و ویژه حالت با پارितه فرد نسبت به ویژه حالت با پارितه زوج، انرژی بیشتری دارد. این نکته در شکل (۲-۱۳) که مولفه شعاعی $\psi(r)$ را برای شعاع 300 Å در سیم رسم کرده نیز قابل مشاهده است. ویژه حالت با پارितه زوج با $(n=1)$ و فرد با $(n=2)$ مشخص می‌شوند.

فصل سوم

پراکندگی در نانوسیم دوبعدی

از دیدگاه نظری ، برای حل مسائل پراکندگی می‌توان از معادله دیفرانسیلی خطی شرودینگر تحت

شرایط مرزی

استفاده کرد.

معادله لیپمن-شوینگر اساسی ترین نقش را در نظریه پراکندگی دارد، زیرا سایر معادلات انتگرالی به طور مستقیم یا غیر مستقیم حاصل بازچینی خاصی از معادله لیپمن-شوینگر هستند [۱۷-۱۸].

۳-۱ معادله لیپمن-شوینگر

در ابتدا مسئله را با فرمول بندی مستقل از زمان فرآیند پراکندگی شروع می‌کنیم. اگر هامیلتونی به صورت زیر تعریف شود:

$$H = H_0 + V \quad (۱-۳)$$

در غیاب پراکندگی، انرژی پتانسیل صفر می‌شود و ویژه حالت انرژی درست شبیه به حالت ذره آزاد خواهد بود.

$$H_0 |\phi\rangle = E |\phi\rangle \quad (۲-۳)$$

اما در صورتی که انرژی پتانسیل مخالف صفر باشد، معادله شرودینگر به صورت زیر خواهد بود:

$$(H_0 + V) |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (۳-۳)$$

در رابطه بالا به ازای $V \rightarrow 0$ رابطه $|\psi\rangle \rightarrow |\phi\rangle$ برقرار خواهد بود که در آن $|\phi\rangle$ جواب معادله شرودینگر ذره آزاد است.

با توجه به این توضیحات جواب دلخواه را به صورت زیر تخمین می‌زنیم: [۳۶]

$$|\psi\rangle = \frac{1}{E - H_0} V |\psi\rangle + |\phi\rangle \quad (۴-۳)$$

به دلیل اینکه در اینجا طیف مقادیر انرژی پیوسته است، از راه حل اختلال نمی‌توان استفاده نمود و با افزودن سهم بسیار ناچیز موهومی ($\varepsilon \rightarrow 0$) به انرژی برای اجتناب از تکینگی به رابطه زیر

می‌رسیم:

$$|\psi^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} V |\psi^{(\pm)}\rangle + |\phi\rangle \quad (5-3)$$

این معادله به معادله لیپمن-شوینگر معروف است. [۳۶]

حال با ضرب $\langle x |$ در دو طرف معادله، رابطه را در پایه‌های مکان محدود می‌کنیم:

$$\langle x | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle x | \phi \rangle + \int d^3x' \left\langle x \left| \frac{1}{E - H_0 \pm i\varepsilon} \right| x' \right\rangle \langle x' | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (6-3)$$

این معادله کلی برای پراکندگی است. اگر $|\phi\rangle$ بیان‌کننده یک موج تخت با تکانه P باشد، می‌توانیم

بنویسیم:

$$\langle x | \phi \rangle = \frac{e^{ip \cdot x / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (7-3)$$

به طوری که شرط بهنجارش به صورت زیر خواهد بود:

$$\int d^3x \langle p' | x \rangle \langle x | p \rangle = \delta^{(3)}(p - p') \quad (8-3)$$

از طرف دیگر، اگر معادله لیپمن-شوینگر با استفاده از پایه‌های تکانه نوشته شود، داریم:

$$\langle p | \psi^{(\pm)} \rangle = \langle p | \phi \rangle + \frac{1}{E - \left(\frac{p^2}{2m} \right) \pm i\varepsilon} \langle p | V | \psi^{(\pm)} \rangle \quad (9-3)$$

۳-۲ معادله لیپمن-شوینگر در پراکندگی سیم کوانتومی

در این بخش ما از معادله لیپمن-شوینگر برای حل مسئله استفاده خواهیم کرد.

یکی از مزیت‌های استفاده از معادله لیپمن-شوینگر این است که معادله انتگرالی تابع موج حاصل در مسائل پیچیده به سری بورن می‌رسد که تقریبی سودمند برای حل مسئله است.

۳-۳ معادله لیپمن-شوینگر در سیم کوانتومی دو بعدی

با توجه به توضیحات ذکر شده، حال با استفاده از تابع گرین، سری بورن و تعریف ماتریس T به حل معادله می‌پردازیم. مراحل حل معادله برای پیدا کردن ضرایب عبور و بازتاب در یک سیم دو بعدی به ترتیب زیر است.

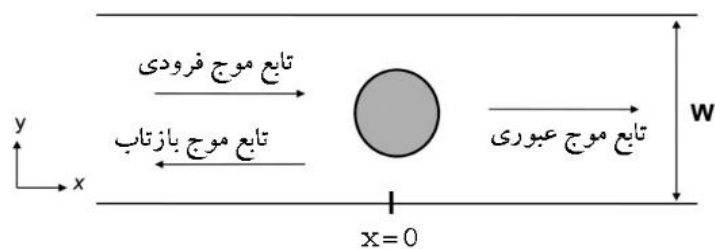
(۱) ابتدا ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقادیر ذره در یک سیم دوبعدی را با توجه به شکل (۳-۱) تعیین می‌کنیم.

(۲) تابع گرین را بر مبنای ویژه‌حالت‌ها و ویژه‌مقادیر به دست آمده محاسبه می‌کنیم.

(۳) ماتریس T را با کمک تابع گرین و سری بورن بر مبنای پتانسیل پراکندگی به دست می‌آوریم.

(۴) تابع موج کل را که مجموعه‌ای از تابع موج پراکندگی و تابع موج اولیه سیستم است، محاسبه می‌کنیم.

(۵) با استفاده از تابع موج کل ضرایب عبور و بازتاب حاصل از پراکندگی را محاسبه می‌کنیم.



شکل (۳-۱) نمای شماتیک امواج حاصل از پراکندگی در یک سیم دو بعدی (مکان ناخالصی بصورت دایره مشخص شده است)

۳-۳-۱ تعیین ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر اولیه

همان‌طور که در شکل (۱-۳) مشاهده می‌کنید، سیم کوانتومی با فرض پتانسیل محدودیت عرضی دیوار سخت در راستای y بین مقادیر 0 تا w محدود است. همچنین این سیم در راستای x نامحدود است. بنابراین الکترون در راستای y مانند حرکت یک ذره در چاه پتانسیل یک بعدی است و از طرفی در راستای x این ذره به صورت یک الکترون آزاد رفتار خواهد کرد. بنابراین تابع موج آن را بر حسب معادله شرودینگر به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} |\psi(x, y)\rangle + V(y) |\psi(x, y)\rangle = E_{x,y} |\psi(x, y)\rangle \quad (۱۰-۳)$$

با توجه به شکل پتانسیل به صورت $V(y) = \begin{cases} 0 \rightarrow (0 < y < w) \\ \infty \rightarrow (\text{elsewhere}) \end{cases}$ و حل معادله ویژه مقادیری به

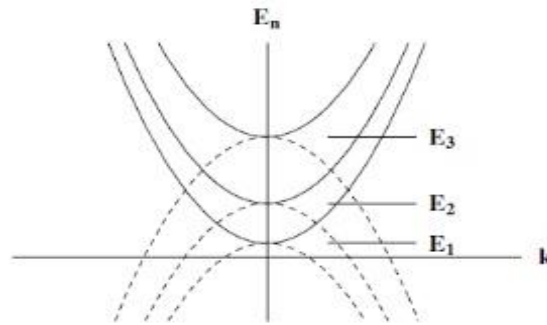
روابط زیر می‌رسیم:

$$\langle x | \phi \rangle = \frac{e^{ip \cdot x / \hbar}}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \quad (۱۱-۳)$$

$$E_{x,y} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(k_x^2 + \left(\frac{n_y \pi}{w} \right)^2 \right) \quad (۱۲-۳)$$

به طوری که در رابطه تابع حالت $\phi_n(y) = \sqrt{\frac{2}{w}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{w}\right)$ است و E انرژی فرمی و E_n انرژی

استانه زیر نوار Π ام سیستم است.



شکل (۲-۳) رابطه پراکندگی حالت‌های ورودی و محوشده در سیم شبه یک بعدی $E = E_n + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}$ برای مدهای خروجی با منحنی‌های $E > E_n$ نشان داده شده و مدهای $K_n = i K_n$ محوشده $E < E_n$ با منحنی‌های خط چین نشان داده شده‌اند. [۲۴].

در شکل (۲-۳) گذار از هر انرژی به زیر نوارهای خط چین، معرف یک مد محوشونده و گذار از هر انرژی به زیر نوارهای انرژی پایین (خطوط ممتد) معرف یک حالت انتشاری است. به طوری که اگر $k_n^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(E - E_{n'})$ است. اگر $E_{n'}$ از انرژی فرمی کمتر باشد، مد پراکنده n' ، مد انتشاری و اگر $E_{n'}$ از انرژی فرمی بیشتر باشد، مد پراکنده n' ، مد محوشونده است. به طوری که در شکل (۳-۳) نشان داده شده است، برای مدهای محوشونده رابطه $k_n^2 = \left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)(E_{n'} - E)$ برقرار خواهد بود.

۳-۲ محاسبه تابع گرین

همانطور که در بخش‌های قبلی اشاره شد برای به دست آوردن تابع موج پراکندگی نیاز به محاسبه تابع گرین داریم. با توجه به این که معادله لیپمن-شوینگر به صورت $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \left(\frac{V}{E - H_0}\right)|\psi\rangle$ است. تابع گرین به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$G_0 = G_{H_0}(E) = \lim_{E \rightarrow 0} (E - H_0 + i\epsilon)^{-1} \quad (۱۳-۳)$$

معادله لیپمن-شوینگر به صورت زیر در می‌آید:

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + G_0 V |\psi\rangle \rightarrow \boxed{|\psi\rangle = (1 - G_0 V)^{-1} |\psi_0\rangle} \quad (۱۴-۳)$$

سری بورن:

برای حل این معادله از روش تکرار استفاده می‌کنیم. با این روش به تقریب کلی زیر می‌رسیم:

$$|\psi\rangle = (1 + G_0 V + G_0 V G_0 V + G_0 V G_0 V G_0 V + \dots) |\psi_0\rangle \quad (۱۵-۳)$$

این سری معروف به سری بورن است. حال با تعریف G_0 رابطه را به صورت انتگرالی می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r}) &= \psi_0(\vec{r}) + \int dV' G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_0(\vec{r}') \\ &+ \int dV' dV'' G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') G_0(\vec{r}', \vec{r}'') V(\vec{r}'') \psi_0(\vec{r}'') + \dots \end{aligned} \quad (۱۶-۳)$$

به طوری که روابط $\psi_0(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi_0 \rangle$ و $G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle$ برقرار است.

حال بر مبنای ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر به دست آمده برای یک الکترون در سیم دوبعدی (۳-۶)

و (۳-۷) مقدار $G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle$ را محاسبه می‌کنیم. ابتدا تعاریف زیر را در نظر می‌گیریم:

$$\begin{aligned} \left| \langle \vec{r}_{(E_n > E)} \rangle \right| &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{\kappa_n x} \phi_n^*(y) & \left| \langle \vec{r}_{(E_n < E)} \rangle \right| &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \phi_n^*(y) \\ \left| \langle \vec{r}'_{(E_n > E)} \rangle \right| &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{\kappa_n x'} \phi_n(y') & \left| \langle \vec{r}'_{(E_n < E)} \rangle \right| &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{-ikx'} \phi_n(y') \end{aligned}$$

با این تعاریف به محاسبه تابع گرین می‌پردازیم:

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \langle \vec{r}_{(E_n < E)} \rangle G_0 \langle \vec{r}'_{(E_n < E)} \rangle + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \langle \vec{r}_{(E_n > E)} \rangle G_0 \langle \vec{r}'_{(E_n > E)} \rangle \quad (۱۷-۳)$$

با جایگذاری ویژه حالت‌ها و استفاده از تعریف انتگرالی تابع گرین را محاسبه می‌کنیم.

$$G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{1}{2 \pi} \phi_{n'}^*(y) \phi_{n'}\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d k' \frac{e^{i k\left|x-x'\right|}}{\frac{\hbar^2}{2 m}\left(k_{n'}^2\right)-\frac{\hbar^2}{2 m}\left(k_{n'}'^2\right)-i \in}$$

$$+\sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{1}{2 \pi} \phi_{n'}^*(y) \phi_{n'}\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d \kappa' \frac{e^{-\kappa\left|x-x'\right|}}{\frac{\hbar^2}{2 m}\left(\kappa_{n'}^2\right)+\frac{\hbar^2}{2 m}\left(\kappa_{n'}'^2\right)+i \in}$$

حال به ساده سازی رابطه می پردازیم:

$$G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{m}{\pi \hbar^2} \phi_{n'}^*(y) \phi_{n'}\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d k' \frac{e^{i k\left|x-x'\right|}}{\left(k_{n'}-k_{n'}'-i \in\right)\left(k_{n'}+k_{n'}'+i \in\right)}$$

$$+\sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{m}{\pi \hbar^2} \phi_{n'}^*(y) \phi_{n'}\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d \kappa' \frac{e^{-\kappa\left|x-x'\right|}}{\left(\kappa_{n'}-\kappa_{n'}'-\in\right)\left(\kappa_{n'}+\kappa_{n'}'+\in\right)}$$

با توجه به این معادله $\oint f(z) dz = 2\pi i (a_{-1})$ از قضیه حساب مانده ها برای حل انتگرال ها

استفاده می کنیم و با توجه به اینکه $\phi_{n'}^*(y) = \phi_{n'}(y)$ به نتیجه کلی زیر می رسیم:

$$G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}\left(y'\right) \frac{e^{i k\left|x-x'\right|}}{2 i k_{n'}}-\sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}\left(y'\right) \frac{e^{-\kappa\left|x-x'\right|}}{2 \kappa_{n'}} \quad (18-3)$$

۳-۳ محاسبه ماتریس T

در این بخش با استفاده از تابع گرین (رابطه ۱۸-۳) و سری بورن، ماتریس T را بصورت زیر تعریف

می کنیم:

$$T\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=V\left(\vec{r}\right) \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)+V\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right)+\int d V \dot{V}\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}^*\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right)+\dots \quad (19-3)$$

تابع پتانسیل پراکندگی را برابر $V\left(\vec{r}\right)=\gamma \delta(x) \delta\left(y-y_i\right)$ در نظر می گیریم. (y_i) مکان

ناخالصی است) با جایگذاری تابع گرین و تابع پتانسیل پراکندگی و ساده سازی مسئله، با استفاده از

رابطه (۱۶-۳)، ماتریس T به صورت زیر خواهد بود:

$$T(\vec{r}, \vec{r}') = T(\vec{r}, \vec{r}') \quad (20-3)$$

$$= V(\vec{r}) \delta(\vec{r} - \vec{r}') + V(\vec{r}) G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') + \int_0^{\infty} dy \int_{-\infty}^{\infty} dx V(\vec{r}) G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') G(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') + \dots$$

با محاسبه رابطه (۲۰-۳) بر حسب پتانسیل پراکندگی و تابع گرین به رابطه زیر می‌رسیم:

$$T(\vec{r}, \vec{r}') = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x - x') \delta(y - y') \quad (21-3)$$

$$+ \gamma^2 \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\phi_n(y) \phi_n(y') e^{\frac{ik|x-x'|}{2ik_n}}}{1 - \gamma \phi_n^2(y_i)} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\phi_n(y) \phi_n(y') e^{\frac{-\kappa|x-x'|}{2\kappa_n}}}{1 - \gamma \phi_n^2(y_i)} \right]$$

حال با استفاده از این رابطه می‌توانیم تابع موج پراکندگی را به دست بیاوریم.

۳-۳-۴ محاسبه تابع موج پراکندگی

در این مرحله تابع موج پراکندگی را با تعریف زیر به دست می‌آوریم:

$$\psi_s(\vec{r}) = \int d\vec{r}' d\vec{r}'' G(\vec{r}, \vec{r}') T(\vec{r}, \vec{r}'') \psi_0(\vec{r}'') \quad (22-3)$$

با جایگذاری تابع گرین، تابع موج اولیه الکترون $\psi_0(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \phi_n(y)$ و ماتریس T از رابطه

(۲۱-۳) به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\psi_s(\vec{r}) = \iiint dx' dy' dx'' dy'' \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx'} \phi_n(y') \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \phi_n(y) \phi_n(y') e^{\frac{ik|x-x'|}{2ik_n}} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') e^{\frac{-\kappa|x-x'|}{2\kappa_n}} \right] \times \quad (23-3)$$

$$\gamma^2 \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\phi_n(y) \phi_n(y') e^{\frac{ik|x-x'|}{2ik_n}}}{1 - \gamma \phi_n^2(y_i)} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\phi_n(y) \phi_n(y') e^{\frac{-\kappa|x-x'|}{2\kappa_n}}}{1 - \gamma \phi_n^2(y_i)} \right]$$

$$+ \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x - x') \delta(y - y')$$

با توجه به توابع دلتا حل انتگرال تقریباً ساده شده و به نتیجه زیر می‌رسیم:

$$\psi_s(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n \cdot |x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-i}{2\kappa_n \left(1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{2m\gamma \phi_n^2(y_i)}{\hbar^2 2ik_n} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{2m\gamma \phi_n^2(y_i)}{\hbar^2 2\kappa_n} \right)} \right] \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i) \phi_n(y_i)$$

$$+ \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n \cdot |x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-1}{2\kappa_n \left(1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{2m\gamma \phi_n^2(y_i)}{\hbar^2 2ik_n} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{2m\gamma \phi_n^2(y_i)}{\hbar^2 2\kappa_n} \right)} \right] \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i) \phi_n(y_i)$$

با توجه به تعریف رابطه $D = \left(1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{2m\gamma \phi_n^2(y_i)}{\hbar^2 2ik_n} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{2m\gamma \phi_n^2(y_i)}{\hbar^2 2\kappa_n} \right)$ و تعریف

$$S_{nn} = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i) \phi_n(y_i) \quad \text{تابع موج پراکندگی به صورت زیر نوشته می شود:}$$

$$\psi_s(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n \cdot |x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-i}{2\kappa_n D} \right] S_{nn} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n \cdot |x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-1}{2\kappa_n D} \right] S_{nn} \quad (24-3)$$

۳-۳-۵ تابع موج کل

در این مرحله تابع موج کل را که از مجموع دو تابع موج اولیه سیستم و تابع موج پراکندگی به دست

می آید، به صورت زیر می نویسیم:

$$\psi_p(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \phi_n(y) + \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n \cdot |x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-i}{2\kappa_n D} \right] S_{nn} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n \cdot |x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-1}{2\kappa_n D} \right] S_{nn} \quad (25-3)$$

در رابطه (۲۵-۳) عبارت اول، تابع موج اولیه و عبارت دوم تابع موج پراکندگی می باشد.

۳-۳-۶ محاسبه ضرایب بازتاب و عبور

با توجه به رابطه (۳-۲۵) به عنوان تابع کلی سیستم، با توجه به علامت $|x|$ در $e^{ik|x|}$ توابع موج بازتاب

و عبور را معین می‌کنیم. دو حالت داریم:

تابع موج به ازای $(x < 0)$:

$$\psi(\vec{r})_{(x < 0)} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ik_n \cdot x} \phi_n(y) + \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{-ik_n \cdot x}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-i}{2\kappa_n \cdot D} \right] S_{nn'} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{\kappa_n \cdot x}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-1}{2\kappa_n \cdot D} \right] S_{nn'} \quad (۳-۲۶)$$

به این ترتیب با توجه به رابطه (۳-۲۶) دامنه موج بازتابی که دامنه موج حاوی عبارت $e^{-ik_n \cdot x}$ است،

برابر خواهد بود با:

$$r = \left[\frac{-i}{2\kappa_n \cdot D} \right] S_{nn'} \quad (۳-۲۷)$$

و احتمال بازتاب موج برابر است با:

$$R = |r|^2 \quad (۳-۲۸)$$

با توجه به این رابطه به ازای $\gamma \rightarrow 0$ ، $s_{nn} \rightarrow 0$ میل می‌کند و در نتیجه $R=0$ می‌شود.

تابع موج به ازای $(x > 0)$:

$$\psi(\vec{r})_{(x > 0)} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ik_n \cdot x} \phi_n(y) + \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n \cdot x}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-i}{2\kappa_n \cdot D} \right] S_{nn'} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n \cdot x}}{\sqrt{2\pi}} \phi_n(y) \left[\frac{-1}{2\kappa_n \cdot D} \right] S_{nn'} \quad (۳-۲۹)$$

به این ترتیب با توجه به رابطه (۳-۲۹) دامنه موج بازتابی برابر خواهد بود با:

$$t_{nn'} = \delta_{nn'} + \left[\frac{-i}{2\kappa_n \cdot D} \right] S_{nn'} \quad (۳-۳۰)$$

باید توجه داشت که اگر $n \neq n'$ برقرار باشد، $r_{nn'} = t_{nn'}$ می‌شود. همچنین رابطه $r_{nn} = t_{nn} - 1$ برای

شرط $n = n'$ برقرار است. دامنه‌های عبوری درون نواری $t_{nn}(E)$ تاثیر پراکندگی مد n به مد n'

را نشان می دهد. دامنه های جریان عبوری به سادگی با ضرب $t_{nn'}(E)$ در $\sqrt{k_{n'}/k_n}$ به دست می آید.

دامنه جریان عبوری $\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{k_{n'}/k_n} t_{nn'}$ دامنه احتمال الکترون فرودی در مد چپ n را معرفی می کند که به مد راست n' منتقل خواهد شد.

احتمال عبور موج که حاصل از دو موج فرودی و پراکنده است برابر خواهد بود با:

$$T = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (31-3)$$

با توجه به این رابطه به ازای $\gamma \rightarrow 0$ ، در نتیجه $T = 1$ می شود.

این رابطه احتمال انتقال الکترون انتشاری از مد چپ n به مد راست n' را تعیین می کند. به این ترتیب رسانندگی لاندائور را به صورت زیر می توان نوشت [۲۸-۲۹]:

$$G = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} T_{nn'} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (32-3)$$

به طوری که n و n' تنها مدهای نرمال پراکنده سیم را مشخص می کند. این تابع گرین را می توان برای اشکال مختلف پتانسیل های پراکنندگی به کار برد.

با تکرار رابطه (۳-۲۵) می توان به سری های بورن رسید که تقریبی کاربردی برای حل معادلات با پتانسیل پیچیده تر است. همچنین به کمک این روش مسئله با حضور دو تابع پراکنندگی δ را که دامنه عبور مدهای اول و بالاتر بیان میکند، می توان حل کرد.

هدف ما بیان خلاصه اثر عبوری کامل با توجه به نمونه ساده ای است که در آن مد اول مد انتشاری و مد دوم مد محوشونده در مرتبه انرژی $E_1 < E < E_2$ است. احتمال عبور از رابطه (۳-۳۴) به صورت زیر است:

$$T_{11} = |t_{11}|^2 = \left[1 + \left(\frac{S_{11}}{2k_1} \right)^2 \left(\frac{2\kappa_2}{2\kappa_2 + S_{22}} \right)^2 \right]^{-1} \quad (33-3)$$

احتمال عبور T_{11} از رابطه (۳-۳۳) در شکل (۳-۵) برای پتانسیل پراکننده δ دافعه (خط سیاه) و جاذبه (خط قرمز) نشان داده شده است. فرض کنید که چاه مربعی محدود در طول راستای y با پهنای $W = 30nm$ باشد. جرم الکترون را برابر جرم موثر گالیم آرسنیک می‌گیریم که برابر 0.067 جرم الکترون آزاد است.

ناخالصی در فاصله $5/12$ از کناره سیم قرار گرفته است.

با این پارامترها، انرژی زیرنوارها برابر، $E_1 = 6.236 \text{ meV}$ ، $E_2 = 24.94 \text{ meV}$ ، $E_3 = 56.12 \text{ meV}$

$E_4 = 99.78 \text{ meV}$ و $E_5 = 155.9 \text{ meV}$ است. زمانی که انرژی فرمی به مینیمم دومین زیرنوار در $E = E_2$

می‌رسد، در معادله (۳-۳۳)، $K_2 = 0$ است و عبور مد فرودی کامل خواهد بود $T_{11} = 1$.

این اثر عبور کامل که به وسیله‌ی سو و سوربلو^{۱۰} برای اولین بار معرفی شد [۱۶]، در هر دو تابع پتانسیل دافعه و جاذبه به دست می‌آید. الکترون‌ها از مد فرودی $n = 1$ می‌توانند پراکنده شوند و در مد محوشونده $n = 2$ حول پراکنده کننده جمع شوند و این تجمع باعث بهبود در عبور در کمینه زیر نوار دوم می‌شود. برای پراکنده کننده جاذبه که در آن $\gamma < 0$ است، ممکن است، رابطه $2K_2 + S_{22} = 0$ در معادله (۳-۳۳) ارضاء گردد.

انرژی که این رابطه را ارضاء می‌کند متناظر با حالت شبه مقید است که در آستانه زیر نوار دوم، رخ می‌دهد. در این حالت مطابق معادله (۳-۳۳) احتمال عبور صفر است. ($T_{11} = 0$) بنابراین بازتاب کامل روی می‌دهد. ($R_{11} = 1$)

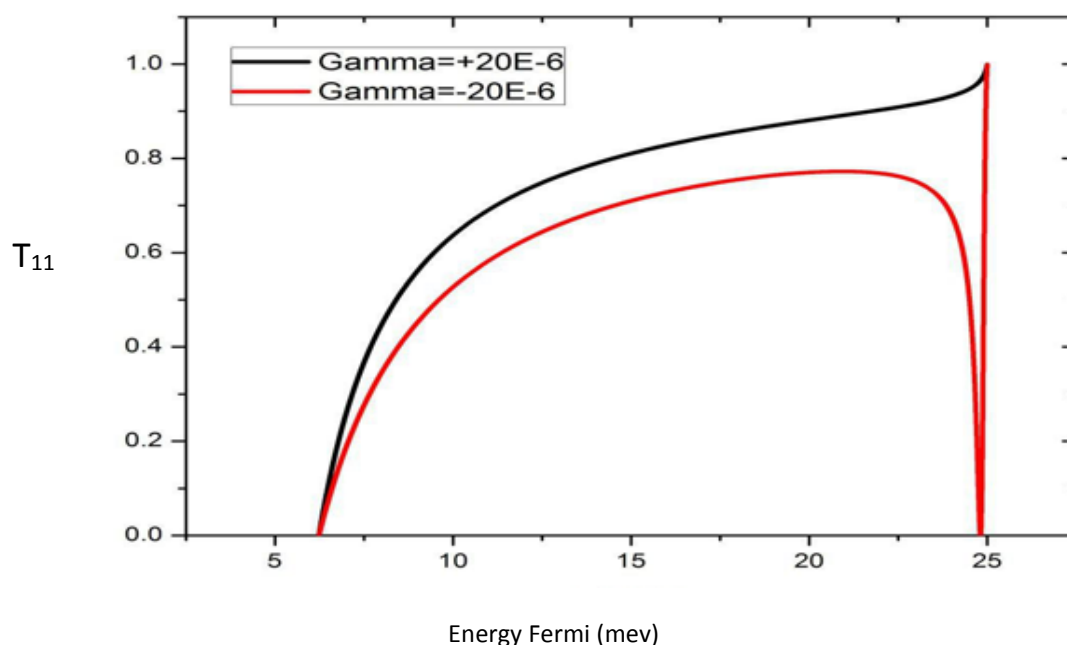
منشا تشدید تجمع الکترون‌ها در حالت شبه مقید پس از ترک کانال فرودی است. این تجمع الکترون‌ها، بر عکس بازخوردی قوی بر روی عبور در کانال فرودی ایجاد می‌کند.

¹⁰ Chu and Sorbello

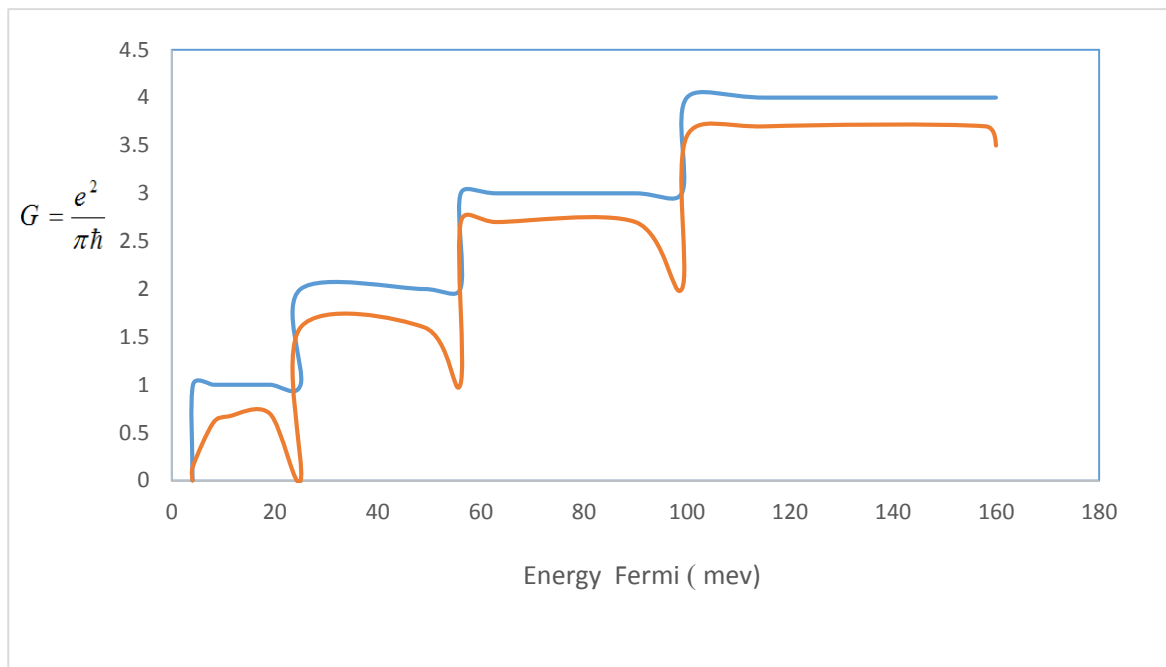
ماتریس عبور t_{nn} رابطه (۳-۳۰) شامل هر جابجایی فاز ممکن است که از الکترون عبوری در سیم به دست می‌آید. برای نمونه‌ای ساده‌تر در شکل (۳-۳) دامنه عبور می‌تواند به صورت جمله فازی ϕ_T الکترون عبوری به صورت زیر تعریف کرد [۳۶]:

$$t_{11} = (1+a^2)^{-1/2} e^{i\phi_T} \quad (۳-۳۴)$$

به طوری که $a = \left(\frac{S_{11}}{2k_1} \right) \left(\frac{2\kappa_2}{S_{22}} + 2\kappa_2 \right)$ و $\phi_T = \cos^{-1} \left[(1+a^2)^{-1/2} \right]$ است.



شکل (۳-۳) احتمال عبور T_{11} برحسب انرژی فرمی در طول یک تابع δ دافعه با قدرت $\gamma = 10 \text{ feVcm}^2$ و یک تابع پراکندگی δ جاذبه با قدرت $\gamma = -20 \text{ feVcm}^2$ در یک سیم دوبعدی [۳۶]



شکل (۳-۴) نمودار رسانندگی G بر حسب انرژی فرمی در طول یک تابع δ دافعه (آبی) با قدرت $\gamma = 10 \text{ feVcm}^2$

و یک تابع پراکندگی δ جاذبه (قرمز) با قدرت $\gamma = -6 \text{ feVcm}^2$ در یک سیم دو بعدی [۳۶]

فصل چهارم

پراکندگی نانوسیم دوبعدی در حضور
میدان مغناطیسی

در این فصل با اضافه کردن یک میدان قوی مغناطیسی به هامیلتونی، مسئله پراکندگی را برای یک گاز کوانتومی دوبعدی با پتانسیل پراکندگی تابع دلتای دیراک با رهیافتی نظیر فصل قبل حل خواهیم کرد [۳۶]. به طور کلی با اضافه کردن اثر میدان مغناطیسی، ویژه مقادیر و ویژه حالت‌های سیستم تغییر می‌کنند و این تغییر باعث ایجاد تفاوت‌های واضح در ترابرد الکترونی در مقایسه با ترابرد در دستگاه الکترونی در غیاب میدان مغناطیسی می‌شود. [۳۵ و ۳۸].

مراحل حل مسئله به ترتیبی خواهد بود که در فصل قبل به تفصیل آورده شده است.

۴-۱ معادله لیپمن-شوینگر در سیم کوانتومی دو بعدی

مشابه فصل قبل، با استفاده از تابع گرین و تعریف ماتریس T به حل معادله می‌پردازیم. مراحل حل معادله برای پیدا کردن ضرایب عبور و بازتاب در یک سیم دوبعدی به ترتیب زیر خواهد بود:

(۱) ابتدا ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر ذره در گاز الکترون دو بعدی در حضور میدان مغناطیسی را تعیین می‌کنیم.

(۲) تابع گرین را بر مبنای ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر به دست آمده محاسبه می‌کنیم.

(۳) ماتریس T را با کمک تابع گرین بر مبنای پتانسیل پراکندگی به دست می‌آوریم.

(۴) تابع موج کل را که مجموعه‌ای از تابع موج پراکندگی و تابع موج اولیه سیستم است، محاسبه می‌کنیم.

(۵) با استفاده از تابع موج کل ضرایب عبور و بازتاب حاصل از پراکندگی را محاسبه می‌کنیم.

۴-۱-۱ تعیین ویژه حالت‌ها و ویژه مقادیر اولیه

دستگاهی شامل گاز الکترون دو بعدی در راستای $x-y$ را در نظر می‌گیریم که تحت اثر میدان مغناطیسی قوی B ، هم جهت با محور Z ، قرار دارد. می‌توان با استفاده از پیمانه لاندائو میدان مغناطیسی را از پتانسیل برداری $A = (B_y, 0, 0)$ بدست آورد.

هامیلتونی سیستم بدون در نظر گرفتن پتانسیل پراکندگی به صورت زیر است:

$$\vec{B} = B \hat{z}$$

$$H_0 = \frac{1}{2m^*} \left(p_x + \frac{e}{c} B y \right)^2 + \frac{p_y^2}{2m^*} + \mu_B B \hat{z} \quad (1-4)$$

با چشم پوشی از برهم کنش اسپین با میدان خارجی، هامیلتونی را به صورت زیر باز نویسی می کنیم:

$$H_0 = \frac{1}{2\mu} \left(p - \frac{e}{c} A \right)^2 = \frac{1}{2\mu} \left(p_y^2 + p_x^2 + \frac{2eB}{c} y p_x + \left(\frac{eB}{c} \right)^2 y^2 \right) \quad (2-4)$$

به سادگی می توان دید که ویژه حالت متناظر با هامیلتونی فوق برابر با عبارت زیر خواهد بود:

$$\psi(x, y) = e^{ikx} \phi(y) \quad (3-4)$$

به طوری که $\phi(y)$ برابر است با:

$$\frac{1}{2\mu} \left(-\hbar^2 \frac{d^2}{dy^2} + \left(\frac{eB}{c} \right)^2 \left(y + \frac{\hbar ck}{eB} \right)^2 \right) \phi(y) = E \phi(y) \quad (4-4)$$

این معادله مشابه معادله شرودینگر برای یک نوسانگر هماهنگ است که نقطه تعادل آن به جای اینکه

در $y = 0$ باشد، در نقطه $y_0 = \hbar ck / eB$ است. جواب ها به صورت $\psi(x, y) = e^{ieBy_0 x / \hbar c} \phi(y - y_0)$

خواهند بود. به طوری که با مقایسه این رابطه با پتانسیل نوسانگر هماهنگ $\mu \omega^2 y^2 / 2$ می توان

فرکانسی به صورت $\omega_c \equiv -eB / \mu c$ را تعریف کرد که اصطلاحاً فرکانس زاویه ای سیکلوترونی نامیده

می شود. ویژه مقادیر انرژی این هامیلتونی عبارت اند از:

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5-4)$$

که این ترازهای انرژی را ترازهای لاندائو می نامند.

با احتساب بر هم کنش اسپین الکترون با میدان مغناطیسی ویژه مقادیر انرژی به شکل زیر خواهد بود:

$$E_{x,y} = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \pm \frac{\mu_B B}{2} \quad (6-4)$$

$\phi_n(y)$ ویژه حالت حرکت ذره در راستای y است که به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$\phi_n(y) = \xi_n(y + y_0) \quad (7-4)$$

معرف مرکز حرکت سیکلوترونی است و $l = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$ معرف طول مغناطیسی (شعاع حرکت

الکترونی) است که رابطه $y_0 = k_y l^2$ را منتج می‌شود. همچنین تابع $\xi_n(y + y_0)$ به صورت زیر تعریف می‌شود که در آن H_n تابع هرمیتی می‌باشد:

$$\xi_n(y + y_0) = \left(\sqrt{\pi} l 2^n n!\right)^{-\frac{1}{2}} H_n \left[\frac{(y + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y + y_0)^2}{2l^2} \right] \quad (8-4)$$

مطابق با شکل (۲-۳) که در فصل قبل آمده است، اگر E_n از انرژی فرمی کمتر باشد، مد پراکنده n' مد انتشاری و اگر E_n از انرژی فرمی بیشتر باشد، مد پراکنده n' مد محو شونده است. و برای مدهای محوشونده رابطه $k_n^2 = \left(2m/\hbar^2\right)(E_n - E)$ برقرار خواهد بود.

۴-۱-۲ محاسبه تابع گرین

همانطور که در بخش‌های قبلی اشاره شد برای به دست آوردن تابع موج پراکندگی نیاز به محاسبه

تابع گرین داریم. با توجه به این که معادله لیپمن شوینگر به صورت $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \left(\frac{V}{E - H_0}\right)|\psi\rangle$ است.

تابع گرین به صورت زیر تعریف می‌شود:

(۹-۴)

$$G_0 = G_{H_0}(E) = \lim_{E \rightarrow 0} (E - H_0 + i \epsilon)^{-1}$$

معادله لیپمن-شوینگر به صورت زیر در می آید:

$$|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + G_0 V |\psi\rangle \rightarrow \boxed{|\psi\rangle = (1 - G_0 V)^{-1} |\psi_0\rangle} \quad (10-4)$$

سری بورن:

برای حل این معادله از روش تکرار استفاده می کنیم. با این روش به تقریب کلی زیر می رسیم:

$$|\psi\rangle = (1 + G_0 V + G_0 V G_0 V + G_0 V G_0 V G_0 V + \dots) |\psi_0\rangle \quad (11-4)$$

این سری معروف به سری بورن است. حال با تعریف G_0 رابطه را به صورت انتگرالی می نویسیم:

$$\psi(\vec{r}) = \psi_0(\vec{r}) + \int dV G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') \psi_0(\vec{r}') \quad (12-4)$$

$$+ \int dV' dV'' G_0(\vec{r}, \vec{r}') V(\vec{r}') G_0(\vec{r}', \vec{r}'') V(\vec{r}'') \psi_0(\vec{r}'') + \dots$$

به طوری که روابط $\psi_0(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \psi_0 \rangle$ و $G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle$ برقرار است.

حال بر مبنای ویژه مقادیر و ویژه حالت های به دست آمده در روابط (۴-۶) و (۴-۷) مقدار

$$G_0(\vec{r}, \vec{r}') = \langle \vec{r} | G_0 | \vec{r}' \rangle \text{ را محاسبه می کنیم.}$$

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \langle \vec{r}_{(E_n < E)} | G_0 | \vec{r}'_{(E_n < E)} \rangle + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \langle \vec{r}_{(E_n > E)} | G_0 | \vec{r}'_{(E_n > E)} \rangle \quad (13-4)$$

تابع گرین را در راستای محور X که حرکت ذره به صورت ذره آزاد است محاسبه خواهیم کرد. در طی

محاسبه سعی خواهیم کرد تا مقادیر ویژه حالت های ذره در راستای Y را تا جای ممکن برای ساده تر

شدن محاسبات، جایگذاری نکنیم و در پایان با جایگذاری این مقادیر تغییرات حاصل از حضور میدان

مغناطیسی را بررسی خواهیم کرد. حال مطابق محاسبات فصل قبل، با جایگذاری ویژه حالت‌ها و استفاده از تعریف انتگرالی تابع گرین را محاسبه می‌کنیم.

$$G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2 \pi} \phi_n^*(y) \phi_n\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d k' \frac{e^{i k\left|x-x'\right|}}{\left[\frac{\hbar^2}{2 m}\left(k_n^2\right)+\left(n'+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c+\frac{\mu_B B}{2}\right]-\left[\frac{\hbar^2}{2 m}\left(k_n'^2\right)+\left(n'+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c+\frac{\mu_B B}{2}\right]-i \in} \\ +\sum_{n=n_c'+1}^{\infty} \frac{1}{2 \pi} \phi_n^*(y) \phi_n\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d \kappa' \frac{e^{-\kappa\left|x-x'\right|}}{\left[\frac{\hbar^2}{2 m}\left(\kappa_n^2\right)+\left(n'+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c+\frac{\mu_B B}{2}\right]+\left[\frac{\hbar^2}{2 m}\left(\kappa_n'^2\right)+\left(n'+\frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c+\frac{\mu_B B}{2}\right]+i \in}$$

همان‌طور که مشاهده می‌کنید، در این رابطه دو جمله وجود دارد. جمله اول مربوط به سهم مدهای انتشاری در تابع گرین بوده و جمله دوم سهم مدهای محو‌شونده (ناپایدار) در تابع گرین را نمایش می‌دهد.

از آنجا که سهم مربوط به برهم‌کنش اسپین الکترون با میدان مغناطیسی ناچیز است، در ادامه از آن صرف‌نظر می‌کنیم و با ساده‌سازی رابطه قبل به رابطه زیر می‌رسیم:

$$G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right)=\sum_{n=1}^{n_F^{\max }} \frac{m}{\pi \hbar^2} \phi_n^*(y) \phi_n\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d k' \frac{e^{i k\left|x-x'\right|}}{\left(k_{n'}-k_{n'}'-i \in\right)\left(k_{n'}+k_{n'}'+i \in\right)} \\ +\sum_{n=n_F^{\max }+1}^{\infty} \frac{m}{\pi \hbar^2} \phi_n^*(y) \phi_n\left(y'\right) \int_{-\infty}^{\infty} d \kappa' \frac{e^{-\kappa\left|x-x'\right|}}{\left(\kappa_{n'}-\kappa_{n'}'-\in\right)\left(\kappa_{n'}+\kappa_{n'}'+\in\right)}$$

با توجه به این معادله از قضیه حساب مانده‌ها $\oint f(z) dz = 2\pi i (a_{-1})$ برای حل انتگرال‌ها

استفاده می‌کنیم و با توجه به اینکه $\phi_n^*(y) = \phi_n(y)$ به نتیجه کلی زیر می‌رسیم که با جایگذاری مقادیر ویژه حالت‌ها، تابع گرین به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$\begin{aligned}
G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) &= \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \\
&= \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{2ikx}}{2\pi l} \left(\sqrt{\pi l} 2^n n!\right)^{-1} \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} H_n\left[\frac{(y+y_0)}{l}\right] H_n\left[\frac{(y'+y_0)}{l}\right] \exp\left[\frac{-(y+y_0)^2 - (y'+y_0)^2}{2l^2}\right] \\
&\quad - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{e^{2ikx}}{2\pi l} \left(\sqrt{\pi l} 2^n n!\right)^{-1} \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} H_n\left[\frac{(y+y_0)}{l}\right] H_n\left[\frac{(y'+y_0)}{l}\right] \exp\left[\frac{-(y+y_0)^2 - (y'+y_0)^2}{2l^2}\right]
\end{aligned} \tag{۱۴-۴}$$

در ادامه به محاسبه ماتریس T بر حسب این تابع گرین می‌پردازیم.

۳-۱-۴ محاسبه ماتریس T

در این بخش با استفاده از تابع گرین (رابطه ۱۴-۴) و تقریب بورن ماتریس T را طبق رابطه زیر به

دست می‌آوریم:

$$T\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) = V\left(\vec{r}\right) \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right) + V\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right) + \int dV \dot{V}\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}''\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right) + \dots \tag{۱۵-۴}$$

همان طور که اشاره شده است، تابع پتانسیل پراکنندگی برابر $V\left(\vec{r}\right) = \gamma \delta(x) \delta(y - y_i)$ است. با

جایگذاری تابع گرین از رابطه (۱۴-۴) و تابع پتانسیل پراکنندگی و ساده سازی مسئله رابطه (۱۵-۴)،

ماتریس T به صورت زیر خواهد بود:

$$T\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) = V\left(\vec{r}\right) \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right) + V\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right) + \int_0^w dy'' \int_{-\infty}^{\infty} dx \dot{V}\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}''\right) V\left(\vec{r}''\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right) + \dots \tag{۱۶-۴}$$

برای محاسبه رابطه (۱۶-۴)، ابتدا حاصل عبارات سمت راست را به صورت تک تک به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned}
V\left(\vec{r}\right) \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right) &= \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x - x') \delta(y - y') \\
V\left(\vec{r}\right) G\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) V\left(\vec{r}'\right) &= \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \right] \gamma \delta(x') \delta(y' - y_i) \\
&= \gamma^2 \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \int_0^w dy' \int_{-\infty}^{\infty} dx \vec{V} \left(\vec{r} \right) G \left(\vec{r}, \vec{r}' \right) V \left(\vec{r}' \right) G \left(\vec{r}, \vec{r}' \right) V \left(\vec{r}' \right) \\
&= \gamma^3 \int_0^w dy' \int_{-\infty}^{\infty} dx \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \\
&\times \left[\sum_{n=1}^{n_F} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \right] \times \left[\sum_{n=1}^{n_F} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \right] \\
&= \gamma^3 \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \\
&\times \left[\sum_{n=1}^{n_F} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \right] \times \left[\sum_{n=1}^{n_F} \phi_n(y) \phi_n(y_i) \frac{e^{ik|x|}}{ik_n} - \sum_{n=n_F+1}^{\infty} \phi_n(y) \phi_n(y_i) \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n} \right]
\end{aligned}$$

با قراردادن روابط بالا در رابطه (4-۱۶) و استفاده از چند رابطه جبری ساده به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\begin{aligned}
T \left(\vec{r}, \vec{r}' \right) &= \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x - x') \delta(y - y') \\
&+ \gamma^2 \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \\
T \left(\vec{r}, \vec{r}' \right) &= \gamma \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x - x') \delta(y - y') \\
&+ \gamma^2 \delta(x) \delta(y - y_i) \delta(x') \delta(y' - y_i) \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n}}{1 - \gamma \phi_n^2(y_i)} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\phi_n(y) \phi_n(y') \frac{e^{-\kappa_n|x-x'|}}{\kappa_n}}{1 - \gamma \phi_n^2(y_i)} \right]
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
T\left(\vec{r}, \vec{r}'\right) &= \gamma \delta(x) \delta(y-y_i) \delta(x-x') \delta(y-y') \\
&+ \gamma^2 \delta(x) \delta(y-y_i) \delta(x') \delta(y'-y_i) \\
&\left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\frac{e^{2ikx}}{2\pi l} (\sqrt{\pi} l 2^n n!)^{-1} H_n\left[\frac{(y+y_0)}{l}\right] H_n\left[\frac{(y'+y_0)}{l}\right] \exp\left[\frac{-(y+y_0)^2 - (y'+y_0)^2}{2l^2}\right] \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_n}}{1 - \gamma \frac{e^{2ikx}}{2\pi l} (\sqrt{\pi} l 2^n n!)^{-1} \left(H_n\left[\frac{(y_i+y_0)}{l}\right]\right)^2 \exp\left[\frac{-(y_i+y_0)^2}{l^2}\right]} \right] \\
&- \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\frac{e^{2ikx}}{2\pi l} (\sqrt{\pi} l 2^n n!)^{-1} H_n\left[\frac{(y+y_0)}{l}\right] H_n\left[\frac{(y'+y_0)}{l}\right] \exp\left[\frac{-(y+y_0)^2 - (y'+y_0)^2}{2l^2}\right] \frac{e^{-k|x-x'|}}{\kappa_n}}{1 - \gamma \frac{e^{2ikx}}{2\pi l} (\sqrt{\pi} l 2^n n!)^{-1} \left(H_n\left[\frac{(y_i+y_0)}{l}\right]\right)^2 \exp\left[\frac{-(y_i+y_0)^2}{l^2}\right]} \right]
\end{aligned}
\tag{۱۷-۴}$$

حال با استفاده از این رابطه می‌توانیم تابع موج پراکندگی را به دست بیاوریم.

۴-۱-۴ محاسبه تابع موج پراکندگی

در این مرحله تابع موج پراکندگی را با تعریف زیر به دست می‌آوریم:

$$\psi_s(\vec{r}) = \int d\vec{r}' d\vec{r}'' G(\vec{r}, \vec{r}') T(\vec{r}, \vec{r}'') \psi_0(\vec{r}'') \tag{۱۸-۴}$$

با جایگذاری تابع گرین، تابع موج اولیه الکترون $\psi_0(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \phi_n(y)$ و ماتریس T از رابطه

(۱۷-۴) به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\psi_s(\vec{r}) = \iiint dx' dy' dx'' dy'' \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx'} \phi_{n'}(y') \left(\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_{n'}} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{\kappa_{n'}} \right) \times$$

$$\gamma^2 \delta(x) \delta(y-y_i) \delta(x') \delta(y'-y_i) \left[\sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{ik|x-x'|}}{ik_{n'}}}{1-\gamma \phi_{n'}^2(y_i)} - \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\phi_{n'}(y) \phi_{n'}(y') \frac{e^{-\kappa_{n'}|x-x'|}}{\kappa_{n'}}}{1-\gamma \phi_{n'}^2(y_i)} \right]$$

$$+\gamma \delta(x) \delta(y-y_i) \delta(x-x') \delta(y-y')$$

(۱۹-۴)

با توجه به توابع دلتا حل انتگرال تقریباً ساده می‌شود و در نتیجه به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\psi_s(\vec{r}) = \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_{n'}|x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_{n'}(y) \left[\frac{-i}{2\kappa_{n'} \left(1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \frac{\phi_{n'}^2(y_i)}{ik_{n'}} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \frac{\phi_{n'}^2(y_i)}{\kappa_{n'}} \right)} \right] \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i)$$

$$+ \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_{n'}|x|}}{\sqrt{2\pi}} \phi_{n'}(y) \left[\frac{-1}{2\kappa_{n'} \left(1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \frac{\phi_{n'}^2(y_i)}{ik_{n'}} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \frac{\phi_{n'}^2(y_i)}{\kappa_{n'}} \right)} \right] \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_{n'}(y_i) \phi_{n'}(y_i)$$

(۲۰-۴)

۵-۱-۴ تابع موج کل

در این مرحله تابع موج کل را که از مجموع دو تابع موج پراکندگی و تابع موج اولیه سیستم به دست

می‌آید، محاسبه می‌کنیم.

مشابه با محاسبات فصل قبل برای ساده تر کردن تحلیل نتایج، با جایگذاری روابط (۷-۴) و (۸-۴)

$$D' = \left(1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_{n'}^2(y_i)}{ik_{n'}} + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_{n'}^2(y_i)}{\kappa_{n'}} \right) \text{ رابطه به دست می آید:}$$

$$D' = 1 - \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{\frac{2m\gamma}{\hbar^2} (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1}}{ik_{n'}} \frac{1}{l^2} \left(H_{n^2} \left[\frac{(y_i + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y_i + y_0)^2}{2l^2} \right] \right)^2$$

$$+ \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{\infty} \frac{\frac{2m\gamma}{\hbar^2} (\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-1}}{\kappa_{n'}} \frac{1}{l^2} \left(H_{n^2} \left[\frac{(y_i + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y_i + y_0)^2}{2l^2} \right] \right)^2$$

و همچنین تعریف $Q_{nn'} = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \phi_n(y_i) \phi_{n'}(y_i)$ به صورت زیر خواهد بود:

$$Q_{nn'} = \frac{2m\gamma}{\hbar^2} \frac{(\pi 2^{n+n'} n! n'!)^{-\frac{1}{2}}}{l^2} H_n \left[\frac{(y_i + y_0)}{l} \right] H_{n'} \left[\frac{(y_i + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y_i + y_0)^2}{l^2} \right]$$

بنابراین، تابع موج کل را به صورت زیر می نویسیم:

$$\psi_p(\vec{r}) = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \frac{(\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-\frac{1}{2}}}{l} H_n \left[\frac{(y + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y + y_0)^2}{2l^2} \right]$$

$$+ \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n |x|}}{\sqrt{2\pi}} \frac{(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'!)^{-\frac{1}{2}}}{l} H_{n'} \left[\frac{(y + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y + y_0)^2}{2l^2} \right] \left[\frac{-i}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'}$$

$$+ \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n |x|}}{\sqrt{2\pi}} \frac{(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'!)^{-\frac{1}{2}}}{l} H_{n'} \left[\frac{(y + y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y + y_0)^2}{2l^2} \right] \left[\frac{-1}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'}$$

(۲۱-۴)

۴-۱-۶ محاسبه ضرایب بازتاب و عبور

با توجه به رابطه (۴-۲۱) به عنوان تابع کلی سیستم، با توجه به علامت $|x|$ در $e^{ik|x|}$ توابع موج بازتاب و عبور را معین می‌کنیم. دو حالت داریم:

تابع موج به ازای $(x < 0)$:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r})_{(x<0)} = & \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \frac{(\sqrt{\pi} 2^n n!)^{-\frac{1}{2}}}{l} H_n \left[\frac{(y+y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y+y_0)^2}{2l^2} \right] \\ & + \sum_{n'=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{-ik_n' x}}{\sqrt{2\pi}} \frac{(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'!)^{-\frac{1}{2}}}{l} H_{n'} \left[\frac{(y+y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y+y_0)^2}{2l^2} \right] \left[\frac{-i}{2\kappa_n' D'} \right] Q_{nn'} \\ & + \sum_{n=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{\kappa_n' x}}{\sqrt{2\pi}} \frac{(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'!)^{-\frac{1}{2}}}{l} H_{n'} \left[\frac{(y+y_0)}{l} \right] \exp \left[-\frac{(y+y_0)^2}{2l^2} \right] \left[\frac{-1}{2\kappa_n' D'} \right] Q_{nn'} \end{aligned} \quad (۴-۲۲)$$

به این ترتیب با توجه به رابطه (۴-۲۲) دامنه موج بازتابی که دامنه موج حاوی عبارت $e^{-ik_n' x}$ است، برابر خواهد بود با:

$$r = \left[\frac{-i}{2\kappa_n' D'} \right] Q_{nn'} \quad (۴-۲۳)$$

و احتمال بازتاب موج برابر است با:

$$R = |r|^2 \quad (۴-۲۴)$$

با توجه به این رابطه به ازای $\gamma \rightarrow 0$ ، میل $Q_{nn} \rightarrow 0$ می‌کند و در نتیجه $R=0$ می‌شود.

تابع موج به ازای $(x > 0)$:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r})_{(x>0)} &= \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \left(\sqrt{\pi} 2^n n! \right)^{-\frac{1}{2}} H_n \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \\ &+ \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{2\pi}} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \left[\frac{-i}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'} \\ &+ \sum_{n'=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n x}}{\sqrt{2\pi}} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \left[\frac{-1}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'}. \end{aligned}$$

به طوری که این رابطه را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\begin{aligned} \psi(\vec{r})_{(x>0)} &= \sum_{n=n'} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \delta_{nn'} \\ &+ \sum_{n=1}^{n_F^{\max}} \frac{e^{ik_n x}}{\sqrt{2\pi}} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \left[\frac{-i}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'} \\ &+ \sum_{n'=n_F^{\max}+1}^{n_c} \frac{e^{-\kappa_n x}}{\sqrt{2\pi}} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \left[\frac{-1}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'}. \end{aligned}$$

با فاکتورگیری از مقدار $\sum_{n'} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right]$ به

ازای تمام مقادیر n' به رابطه زیر می‌رسیم:

$$\psi(\vec{r})_{(x>0)} = \sum_{n'} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right] \left(\delta_{nn'} + \left[\frac{-i}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'} \right) \quad (25-4)$$

با توجه به رابطه (25-4)، دو عبارت را به صورت :

$$t_{nn'} = \left(\delta_{nn'} + \left[\frac{-i}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'} \right) \quad \text{و} \quad \psi_{n'} = \sqrt{\frac{1}{2\pi}} e^{ikx} \left(\sqrt{\pi} 2^{n'} n'! \right)^{-\frac{1}{2}} H_{n'} \left[(y+y_0)/l \right] \exp \left[-(y+y_0)^2 / 2l^2 \right]$$

تعریف می‌کنیم، در نتیجه رابطه (25-4) به شکل زیر بیان می‌شود:

$$\psi(\vec{r})_{(x>0)} = \sum_{n'} t_{nn'} \psi_{n'} \quad (26-4)$$

به این ترتیب با توجه به روابط (۴-۲۵) دامنه موج بازتابی برابر خواهد بود با:

$$t_{nn'} = \delta_{nn'} + \left[\frac{-i}{2\kappa_n D'} \right] Q_{nn'} \quad (۴-۲۷)$$

باید توجه داشت که اگر $n \neq n'$ برقرار باشد، $r_{nn'} = t_{nn'}$ می‌شود.

همچنین رابطه $r_{nn} = t_{nn} - 1$ برای شرط $n = n'$ برقرار است. دامنه‌های عبوری درون نواری $t_{nn}(E)$

تاثیر پراکندگی مد n به مد n' را معرفی می‌کند.

دامنه‌های جریان عبوری به سادگی با ضرب $t_{nn'}(E)$ در $\sqrt{k_{n'}/k_n}$ به دست می‌آید. دامنه جریان

عبوری $\tilde{t}_{nn'} = \sqrt{k_{n'}/k_n} t_{nn'}$ دامنه احتمال الکترون فرودی در مد چپ n را معرفی می‌کند که به مد

راست n' منتقل خواهد شد.

احتمال عبور موج که حاصل از دو موج فرودی و پراکنده است برابر خواهد بود با:

$$T = \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴-۲۷)$$

با توجه به این رابطه به ازای $\gamma \rightarrow 0$ ، در نتیجه $T = 1$ می‌شود.

این رابطه احتمال انتقال الکترون انتشاری از مد چپ n به مد راست n' را تعیین می‌کند. به این

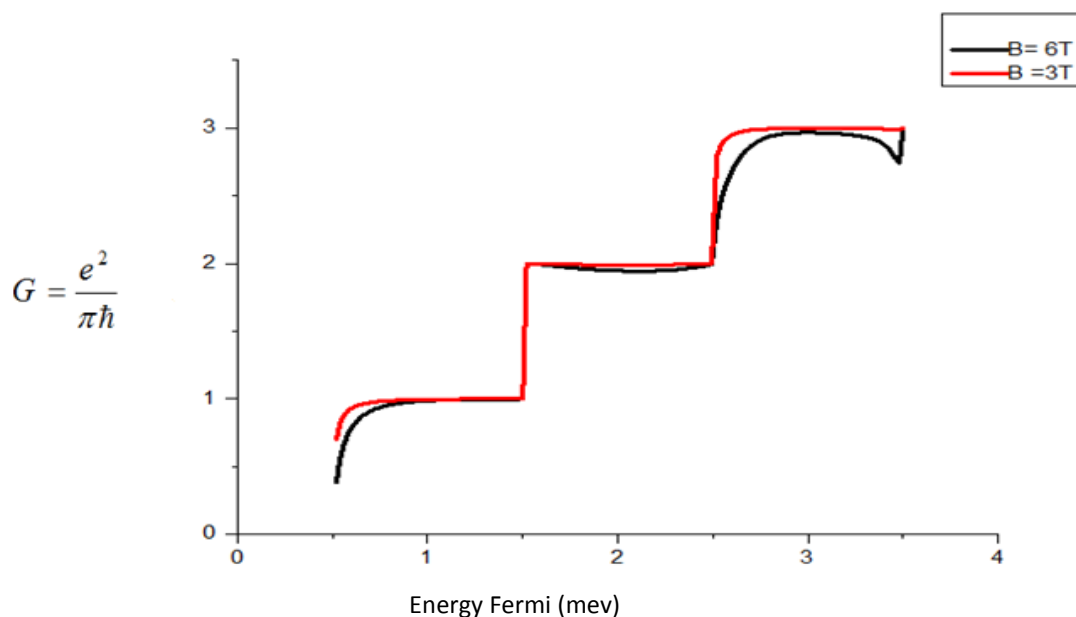
ترتیب رسانندگی را به صورت زیر می‌توان نوشت:

$$G = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} T_{nn'} = \frac{e^2}{\pi \hbar} \sum_{n,n'} \frac{k_{n'}}{k_n} t_{nn'} t_{nn'}^* \quad (۴-۲۹)$$

به طوری که n و n' تنها مدهای نرمال پراکنده سیم را مشخص می‌کند.

به کمک این روش، می‌توان مسئله را با حضور دو تابع پراکندگی δ که دامنه عبور مدهای اول و

بالاتر را بیان می‌کند، حل کرد.



شکل (۱-۴) نمودار رسانندگی G به عنوان تابع انرژی در طول یک تابع پراکندگی δ جاذبه در یک سیم دو بعدی به ازای میدان مغناطیسی خارجی با اندازه میدان ۳ و ۶ تسلا

شکل (۱-۴) نمودار رسانندگی سیستم را بر حسب رابطه (۴-۲۹) بر حسب مقادیر مختلف اندازه میدان مغناطیسی با توجه به رابطه $\omega_c = \frac{eB}{m^*c}$ به عنوان فرکانس تشدید نشان می‌دهد.

این نمودار مانند نمودار شکل (۳-۴) تغییرات رسانندگی نسبت به انرژی سیستم را به صورت یک تابع پله ای با لبه های مدور نشان می‌دهد. فرو رفتگی‌ها نشان می‌دهد که پیش از آستانه شروع هر زیر نوار انرژی (مد بالاتر) رسانندگی کاهش محسوسی می‌یابد. طبق نمودار با افزایش مقدار بزرگی میدان مغناطیسی اعمالی، مقدار این کاهش بیشتر می‌شود و رسانندگی تا سطح مقدار رسانندگی زیرنوار قبلی پیش از آغاز زیرنوار بعدی کاهش می‌یابد.

شکل (۱-۴) که نمودار رسانندگی بر حسب انرژی بر مبنای دو مقدار اندازه میدان مغناطیسی با اندازه‌های ۳ و ۶ تسلا رسم شده است، نشان می‌دهد که تغییرات اندازه میدان تاثیر چندانی بر روند تغییرات رسانندگی سیستم بر حسب انرژی ندارد. به طور دقیق‌تر، با افزایش میدان مغناطیسی در برخی از نقاط رسانندگی سیستم به صورت موضعی کاهش می‌یابد و نوساناتی در نموداری که نشان

دهنده میدان مغناطیسی بیشتر (۶ تسلا) است در شکل مشاهده می شود که ناشی از افزایش اثرات میدان است.

کاهش رسانندگی در آستانه زیر نوار بالاتر می تواند به دلیل افزایش در نرخ تشکیل حالت های شبه مقید باشد.

برای مشاهده واضح تر اثرات میدان بر دامنه انتقال ، مناسب است تا حالت ساده $E_1 < E < E_2$ که در آن مد اول مد انتشاری ($n=1$) و مد دوم مد محوشونده ($n=2$) است، بررسی گردد.

با توجه به رابطه (۴-۳۰)، ضریب عبور با تغییرات اندازه بزرگی میدان مغناطیسی دچار تغییراتی هرچند کم می شود. با توجه به اینکه فرکانس تشدید با اندازه میدان رابطه مستقیم دارد، با تغییر اندازه میدان مغناطیسی فرکانس تشدید تغییر می کند و در نتیجه مقدار ضریب گذار تغییر می کند.

احتمال عبور از رابطه (۴-۲۸) به صورت زیر بیان می گردد:

$$T_{11} = |t_{11}|^2 = \left[1 + \left(\frac{Q_{11}}{2k_1} \right)^2 \left(\frac{2\kappa_2}{2\kappa_2 + Q_{22}} \right)^2 \right]^{-1} \quad (۴-۳۰)$$

نتایج حاصل از لحاظ شکل تابع مشابه نتایج حاصل از پراکندگی در یک سیم کوانتومی است. در رابطه

(۴-۳۰) مقدار Q_{11} به دلیل اینکه حضور میدان ، ویژه حالت سیستم در راستای y را مطابق با رابطه

(۴-۷) تغییر داده است، متفاوت از مقدار S_{11} در رابطه (۳-۳۳) است.

در شکل (۴-۲) تغییرات احتمال عبور T_{11} برای پتانسیل پراکننده δ جاذبه برحسب موضع آن

رسم شده است. همچنین در ادامه مشخص خواهیم کرد که ماتریس عبور t_{nn} رابطه (۴-۳۰) شامل

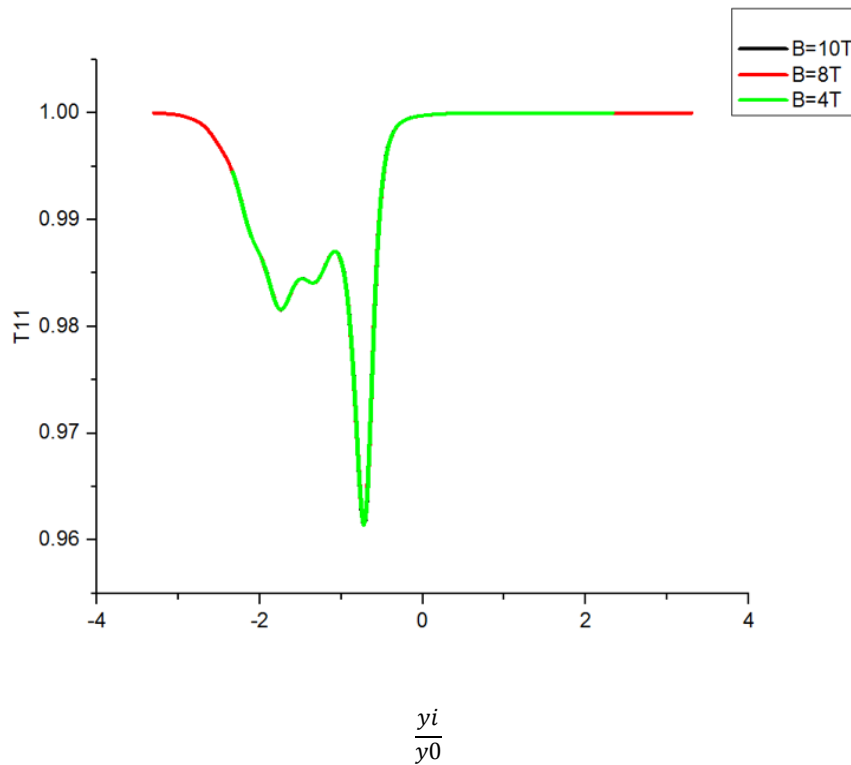
هر جابجایی فاز ممکن است که از الکترون عبوری در سیم به دست می آید.

برای نمونه ای ساده تر در شکل (۴-۲) دامنه عبور می تواند به صورت جمله فازی ϕ_T الکترون عبوری

به صورت زیر تعریف کرد:

$$t_{11} = (1+a^2)^{-1/2} e^{i\phi_T} \quad (31-4)$$

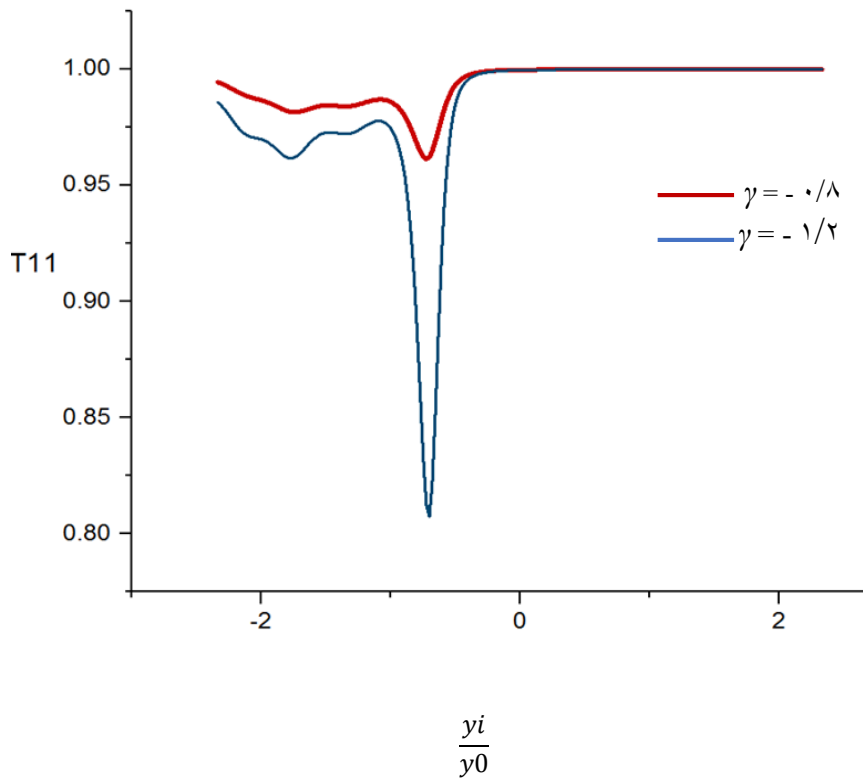
به طوری که $a = \left(\frac{Q_{11}}{2k_1} \right) \left(\frac{2\kappa_2}{Q_{22}} + 2\kappa_2 \right)$ و $\phi_T = \cos^{-1} \left[(1+a^2)^{-1/2} \right]$ است



شکل (۴-۲) احتمال عبور T_{11} به عنوان تابعی از موضع پراکننده در دستگاه الکترونی به ازای مقادیر مختلف اندازه میدان

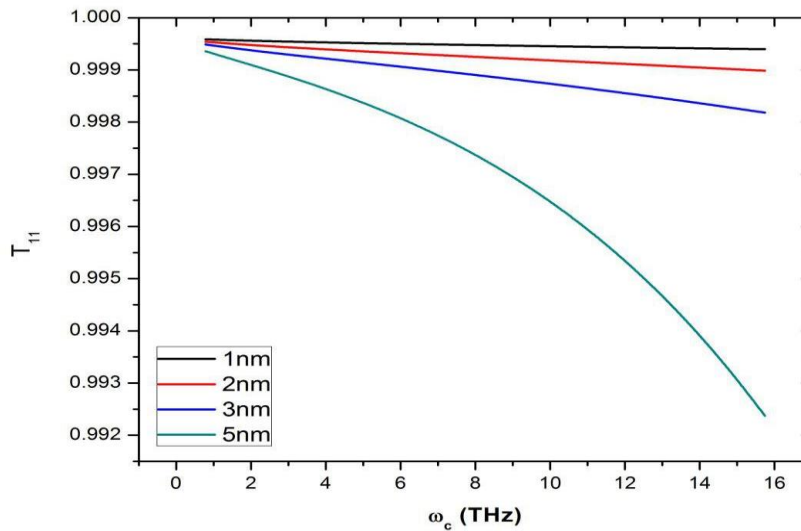
$$\text{مغناطیسی به ازای } \gamma > 0 \quad (\gamma = 0.8, 1.2)$$

بنابر این نمودار، احتمال عبور از مقدار ۱ شروع می‌شود و تا مقدار ۰.۹۶ افت می‌کند و پس از برگشتن به مقدار اولیه بدون تاثیر از اندازه موضع پراکننده، مقداری ثابت به خود می‌گیرد. همان‌طور که مشاهده می‌شود، تغییرات اندازه میدان مغناطیسی خارجی تاثیر قابل ملاحظه‌ای بر احتمال گذار الکترونی سیستم بر حسب موضع پراکننده ندارد.



شکل (۳-۴) احتمال عبور T_{11} به عنوان تابعی از موضع پراکننده در دستگاه الکترونی به ازای مقادیر مختلف اندازه میدان مغناطیسی به ازای $\gamma < 0$

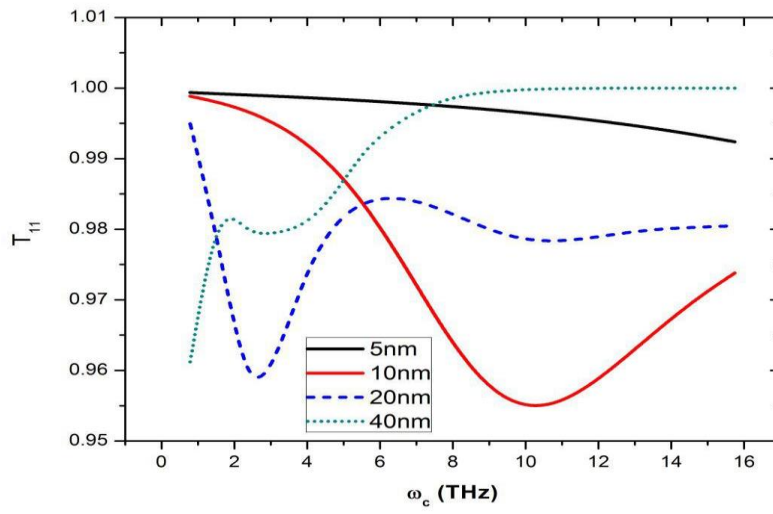
همچنین شکل (۳-۴) نمودار تغییرات احتمال عبور T_{11} به شکل تابعی از موضع پراکننده متناظر با رابطه (۳۰-۴) برحسب مقادیر مختلف اندازه میدان مغناطیسی به ازای مقادیر $\gamma < 0$, $(\gamma = -0.8, -1.2)$ نشان می‌دهد. همانطور که مشاهده می‌شود، مقدار افت گذردهی سیستم به ازای مقادیر $\gamma < 0$ کمتر از نمودار مشابه شکل (۲-۴) به ازای مقادیر $\gamma > 0$ است. با مقایسه نمودارهای دو شکل (۲-۴) و (۳-۴) می‌توان دریافت که تغییرات مقدار γ تاثیر چشم‌گیری در تغییرات ضریب عبور سیستم دارد. کاهش چشم گیر احتمال عبور در حضور پتانسیل جاذبه به واسطه ایجاد حالت های شبه مقید می باشد.



شکل (۴-۴) احتمال عبور T_{11} بر حسب ω_c به ازای مقادیر مختلف y_i
 $y_i = (1-5)nm$

در ادامه به تحلیل تابع احتمال عبور سیستم بر مبنای فرکانس تشدید ω_c که نتیجه مستقیم حضور میدان مغناطیسی خارجی است می پردازیم. دو شکل (۴-۴) و (۵-۴) تغییرات تابع احتمال عبور T_{11} بر مبنای تغییرات فرکانس تشدید را نشان می دهد. شکل (۴-۴) این تغییرات را بر مبنای مقادیر مختلف y_i که نشان دهنده مکان ناخالصی (نقطه پراکندگی) است، به ازای $y_i = (1-5)nm$ نشان می دهد. در واقع هر چه مکان پراکندگی از وسط به کناره های دستگاه نزدیکتر شود، ضریب عبور افزایش یافته و به 1 میل می کند. به عبارتی به واسطه کاهش احتمال پراکندگی ناشی از اثر میدان مغناطیسی و به واسطه تشکیل ترازهای لاندائو، چنین رفتاری مشاهده می گردد.

در اولین تراز لاندائو تابع موج الکترونی، شکلی گوسی داشته و بنا براین احتمال حضور الکترون در کناره ها از ابتدا کم می باشد و قرار گرفتن پراکنده در کناره های دستگاه گاز الکترونی کمترین اثر را بر ترابرد الکترونی خواهد داشت.



شکل (۵-۴) احتمال عبور T_{11} بر حسب ω_c به ازای مقادیر مختلف y_i
 $y_i = (5-40)nm$

نوسانات ظاهر شده در احتمال عبور در شکل (۵-۴) می تواند با نوسانات ویژه حالت های لاندائو در مدهای محو شونده (ناپایدار) و جابجایی های نسبی مدهای انتشاری و محو شونده مرتبط باشد.

فصل پنجم

نتایج و پیشنهادات

۵-۱ نتایج

در تحلیل سیستم‌ها در مقیاس نانو، ناخالصی‌ها که باعث پدیده پراکندگی می‌شوند نقش بسیار مهمی را ایفا می‌کنند. از این رو در این پایان نامه به تحلیل پدیده پراکندگی حاصل از ناخالصی تابع دلتای دیراک دو بعدی در یک گاز الکترون دو بعدی پرداخته شد. برای بررسی از معادلات پراکندگی لیپمن-شوینگر استفاده شده است. ضریب عبور سیستم با توجه به وجود ناخالصی در حضور و غیاب میدان مغناطیسی رفتاری متفاوت از خود نشان می‌دهد.

مطابق نتایج به دست آمده از محاسبات فصل چهارم، تغییرات اندازه میدان مغناطیسی نوساناتی در الگوی بستگی احتمال عبور الکترونی دستگاه به انرژی فرمی ایجاد می‌نماید

در بررسی وابستگی احتمال عبور، به موضع پراکننده برای پتانسیل‌های جاذبه و دافعه با قدرت‌های متفاوت، مشخص شد که وابستگی احتمال عبور الکترون به قدرت پتانسیل برای پتانسیل جاذبه بیشتر از پتانسیل دافعه است. این تفاوت می‌تواند به واسطه پیدایش حالت‌های شبه مقید در حضور پتانسیل جاذبه باشد.

همچنین در پایان نشان دادیم که تغییر مکان ناخالصی باعث تغییر احتمال عبور الکترون در سیستم می‌شود.

۵-۲ پیشنهادات

یکی از مهم‌ترین خلاءها در راستای توسعه تکنولوژی نانو عدم توازن تحقیقات تجربی و نظری است. تعمیق مطالعات تجربی و دستیابی به کاربردهای جدید، نیازمند توسعه مطالعات نظری است و تایید نتایج مطالعات نظری، تنها به واسطه تجربه و آزمایش امکان پذیر خواهد بود.

(۱) بررسی تجربی نتایج بدست آمده در پایان نامه

(۲) بررسی رفتار دستگاه گاز الکترون دو بعدی، زمانی که میدان مغناطیسی در صفحه دستگاه گاز الکترون دو بعدی باشد.

(۳) رهیافت مذکور قابلیت استفاده در بررسی اثرات انواع پتانسیل های پراکندگی دیگر را نیز دارد. بنابراین قابل توسعه به بررسی مسائل دیگر نیز خواهد بود.

- [1] Y. Imry, in *Directions in Condensed Matter Physics*, Vol. 1 (G. Grinstein and G. Mazenko, eds.). World Scientific, Singapore, 1986.
- [2] R. Landauer, *IBM J. Res. Dev.* 1, 223 (1957); 32, 306 (1988).
- [3] H. van Houten and C. W. J. Beenakker, in *Analogies in Optics and Microelectronics* (W. van Haeringen and D. Lenstra, eds.). Kluwer Academic, Dordrecht, 1990.
- [4] M. Büttiker, *Phys. Rev. Lett.* 57, 1761 (1986).
- [5] K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, *Phys. Rev. Lett.* 45, 494 (1980).
- [6] N. Giordano, *Phys. Rev. Lett.* 61, 2137 (1988); J.M. Duan, *ibid.* 74, 5128 (1995); D.S. Golubev and A.D. Zaikin, *Phys. Rev. B* 64, 014504 (2001); K.A. Matveev, A.I. Larkin, and L.I. Glazman, *Phys. Rev. Lett.* 89, 096802 (2002).
- [7] A. Bezryadin, C.N. Lau, and M. Tinkham, *Nature* 404, 971 (2000).
- [8] C.N. Lau, N. Markovic, M. Bockrath, A. Bezryadin, and M. Tinkham, *Phys. Rev. Lett.* 87, 217003 (2001).
- [9] A. Rogachev and A. Bezryadin, *Appl. Phys. Lett.* 83, 512 (2003).
- [10] A.T. Bollinger, A. Rogachev, M. Remeika, and A. Bezryadin, *Phys. Rev. B* 69, 180503(R) (2004).
- [11] B. Camarota, F. Parage, F. Balestro, P. Delsing, and O. Buisson, *Phys. Rev. Lett.* 86, 480 (2001); H.P. Buchler, V.B. Geshkenbein, and G. Blatter, *ibid.* 92, 067007 (2004); S. Sachdev, P. Werner, and M. Troyer, *ibid.* 92, 237003 (2004); S. Khlebnikov, *ibid.* 93, 090403 (2004).
- [12] R.A. Smith, B.S. Handy, and V. Ambegaokar, *Phys. Rev. B* 63, 094513 (2001); P. Xiong, A.V. Herzog, and R.C. Dynes, *Phys. Rev. Lett.* 78, 927 (1997).
- [13] A.A. Abrikosov and L.P. Gor'kov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 39, 1781 (1960) [*Sov. Phys. JETP* 12, 1243 (1961)]; K. Maki and P. Fulde, *Phys. Rev.* 140, A1586 (1965); A.T. Larkin, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 48, 232 (1965) [*Sov. Phys. JETP* 21, 153 (1965)].
- [14] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* 2nd ed. (McGraw-Hill, New York, 1996).
- [15] R. Meservey and P.M. Tedrow, *Physics Reports* 238, 173 (1994); V.Yu. Butko, P.W. Adams, and I.L. Aleiner, *Phys. Rev. Lett.* 82, 4284 (1999).

- [16] D.C. Ralph, C.T. Black, and M. Tinkham, Phys. Rev. Lett. 78, 4087 (1997); F. Braun, J. vonDelft, D.C. Ralph, and M. Tinkham, *ibid.* 79, 921 (1997); A.V. Lopatin and V.M. Vinokur, Phys. Rev. Lett. 90, 047003 (2003).
- [17] B. J. van Wees, H. van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. van der Marel, and C. T. Foxon, Phys. Rev. Lett. **60**, 848 (1988).
- [18] D. A. Wharam, T. J. Thornton, R. Newbury, M. Pepper, H. Ahmed, J. E. F. Frost, D. G. Hasko, D. C. Peacock, D. A. Ritchie, and G. A. C. Jones, J. Phys. C **21**, L209 (1988).
- [19] A. Szafer and A. D. Stone, Phys. Rev. Lett. **62**, 300 (1989).
- [20] L. Escapa and N. Garcia, Appl. Phys. Lett. **56**, 901 (1990).
- [21] C. S. Chu and R. S. Sorbello, Phys. Rev. B **40**, 5941 (1989).
- [22] J. Masek, P. Lipavsky, and B. Kramer, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 6395 (1989).
- [23] I. Kander, Y. Imry, and U. Sivan, Phys. Rev. B **41**, 12 941 (1990).
- [24] P. F. Bagwell, Phys. Rev. B **41**, 10 354 (1990).
- [25] D. Boese, M. Lischka, and L. E. Reichl, Phys. Rev. B **61**, 5632 (2000).
- [26] A. M. Bratkovsky, A. P. Sutton, and T. N. Todorov, Phys. Rev. B **52**, 5036 (1995).
- [27] C. Kunze, L. F. Chang, and P. F. Bagwell, Phys. Rev. B **53**, 10 171 (1996).
- [28] E. Granot, Phys. Rev. B **60**, 10 664 (1999).
- [29] A. Kumar and P. F. Bagwell, Phys. Rev. B **44**, 1747 (1991).
- [30] S. Datta, M. Cahay, and M. McLennan, Phys. Rev. B **36**, 5655 (1987).
- [31] M. Cahay, M. McLennan, and S. Datta, Phys. Rev. B **37**, 10 125 (1988).
- [32] J. J. Sakurai, Modern Quantum Mechanics (Addison, New York, 1994), Chapt. 7.
- [33] M. Buttiker, Y. Imry, R. Landauer, and S. Pinhas, Phys. Rev. B **31**, 6207 (1985).
- [34] R. Landauer, J. Phys.: Condens. Matter **1**, 8099 (1989).
- [35] C. W. J. Beenakker and H. van Houten, “Quantum Transport in Semiconductor Nanostructures”, Published in Solid State Physics, **44**, 1-228 (1991).
- [36] Vassilios Vargiamidis, O. Valassiades, and D. S. Kyriakos, phys. stat. sol. (b) 236, No. 3, 597–613 (2003).
- [37] P.Harrison, Quantumwells, wires, and Dots, second Edition wiley, 2005

Abstract

In recent years the behavior of electron gas in semiconductor nanostructures has attracted much attention. Meanwhile the study of electronic transport and the electronic scattering by defects and impurities have been of special importance.

In the present study, the effect of the electron scattering by the potential of an impurity in the form of Dirac delta function, for a two dimensional electron gas under a strong magnetic field, is investigated via a formalism based on Lippmann-Schwinger equation and Landauer formula.

Results show that the quantized conductance of the system reduces slightly while the strength of the magnetic field is increased. Moreover, the change in the magnitude of the magnetic field will cause oscillations in the pattern of the electronic transmission coefficient as a function of the Fermi energy of the system. It is also observed that the change in the transversal position of the impurity can cause a significant change in the electronic transmission coefficient of the system.

Keywords: Electronic transport ,nanostructure, quantizing magnetic field,



Shahrood University of Technology

Faculty of Science
Department of Physics
Thesis for a master's degree in physics

Title:

**Electronic transport through a nanostructure in
a quantizing magnetic field**

Supervisors:

Dr. Saeid Hessami Pilehrood

Writer:

Maryam Nassiry

Summer 2017